Suche nach kovalenten Kernmolekülen

Den Naturwissenschaftlichen
Fakultäten
der Friedrich-Alexander-Universität
Erlangen-Nürnberg
zur
Erlangung des Doktorgrades

vorgelegt von
Norbert Bischof
aus Ebermannstadt

1986 # 372

Suche nach kovalenten Kernmolekülen

Den Naturwissenschaftlichen Fakultäten
der Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg

zur

Erlangung des Doktorgrades

vorgelegt von
Norbert Bischof
aus Ebermannstadt

Als Dissertation genehmigt von den Naturwissenschaftlichen Fakultäten der Universität Erlangen Nürnberg

Tag der mündlichen Prüfung: 21. 7. 1986

Vorsitzender der Promotionskommision: Prof. Dr. K. Brodersen

Erstberichterstatter: Prof. Dr. H. Voit

Zweitberichterstatter: Prof. Dr. E. Finckh

Inhalt

Zusammenfassung	2
1. Einleitung	3
2. Das Experiment	5
2.1 Überblick	5
2.2 Die Streukammer	7
2.3 Das Flugzeitteleskop	9
2.4 Elektronik und Datenaufnahme	13
2.5 Nachweiswahrscheinlichkeit	16
2.6 Der ^{13}C-Strahl	19
2.7 Targets	19
2.8 Kinematik, Spektren	20
2.9 Normierung	25
2.10 Experimentelle Ergebnisse	27
3. Theoretische Grundlagen	36
3.1 CRC-Formalismus	36
3.2 Rotating Molecular Orbital Modell	46
3.3 Zwei-Stufen-EFR-DWBA	49
4. Moleküleffekte im System $^{13}C+^{12}C$	53
4.1 Bindende Molekülorbitale und Hybridisierung	53
4.2 Nukleare Landau-Zener-Übergänge	67
5. Moleküleffekte im System $^{13}C+^{14}C$	76
6. Diskussion	90
Literaturhinweise	92
Lebenslauf	95
Danksagung	96

Zusammenfassung

Für die Systeme $^{13}C+^{12}C$ und $^{13}C+^{14}C$ wurden Winkelverteilungen der elastischen und inelastischen Streuung, sowie der Neutronentransfers des ^{13}C-Valenzneutrons gemessen.

Die $^{13}C+^{12}C$-Daten wurden im Rahmen einer CRC-Analyse untersucht. Das Auftreten von kovalenten Molekülen und von Hybridisierungseffekten konnte nachgewiesen werden. Eine plötzliche Formänderung in der $^{13}C(1/2^+)$-Winkelverteilung wird als Evidenz für das Auftreten eines Nuklearen Landau-Zener-Effekts interpretiert. Diese Interpretation wird durch die Resultate einer molekularen Rechnung (Rotating Molecular Orbital Model) unterstützt.

Die für das System $^{13}C+^{14}C$ durchgeführten DWBA-Rechnungen zweiter Ordnung reproduzieren die Daten recht gut. Eine Ausnahme bildet der Ausgangskanal $^{12}C+^{15}C(gs)$ (reiner l=1-Transfer). In ihm tritt außerdem ein "out of phase" Verhalten auf. Dies weist auf die Bildung kovalenter Moleküle hin. Eine schnelle Formänderung in der Winkelverteilung ist möglicherweise wie beim $^{13}C+^{12}C$-System als Auswirkung von Landau-Zener-Effekten zu interpretieren.

1. Einleitung

Die Frage, ob beim Stoß von zwei Kernen kurzeitig Kernmoleküle gebildet werden, wird seit über 25 Jahren untersucht. Erste experimentelle Hinweise für die Existenz von Kernmolekülen fand man 1960 im $^{12}C+^{12}C$-System (22). Korrelierte Resonanzen in allen Ausgangskanälen wurden als Evidenz für Kernmoleküle interpretiert.

Es wurde bereits 1960 vermutet, daß diese Moleküle eine dinukleare Struktur haben. Diese Vermutung wurde durch in Erlangen durchgeführte Messungen bestätigt. Aus Präzisionsmessungen der elastischen Streuung wurden Partialbreiten Γ_{el} für den elastischen Kanal bestimmt, die im Vergleich mit der Einteilchenbreite ergaben, daß es sich um eine Dinukleusstruktur handelt. Auch für im System $^{16}O+^{12}C$ auftretende Resonanzen wurde in Erlangen eine Dinukleusstruktur ermittelt (Ref.23,24).

Bemerkenswert ist, daß in beiden Systemen die Kerne abgeschlossene Unterschalen aufweisen. Die Bindung scheint durch kollektive Kräfte zu erfolgen. Die Moleküle in den Systemen $^{12}C+^{12}C$ und $^{16}O+^{12}C$ wurden deshalb als "Kollektive Kernmoleküle" bezeichnet.

Eigentlich wäre es naheliegender gewesen, Moleküle in Systemen mit Valenznukleonen zu suchen. Solche Kernmoleküle wären den kovalenten Molekülen der atomaren Molekülphysik ähnlich. Diese sind durch die Elektronenaustauschwechselwirkung gebunden und durch eine erhöhte Elektronendichte zwischen den Kernen gekennzeichnet. Solche Messungen wurden 1972 in Erlangen für die Protonen- und α-Teilchenausgangskanäle des Systems $^{12}C+^{13}C$ durchgeführt (REF.34). Von Oertzen et al. untersuchten etwa zur gleichen Zeit die elastische Streuung dieses Systems im Rahmen des LCNO-Modells in Zwei-Zustands-Näherung (LCNO: Linear Combination of Nuclear Orbitals) auf das Vorkommen von Mehrfachprozessen (elastische Transfers). Mehrfachaustausch des Valenznukleons bedeutet nichts anderes als Molekülbildung. Die Untersuchungen zeigten, daß diese Prozesse vorzukommen scheinen, aber in der elastischen Streuung schwer nachzuweisen sind.

Später zeigten Imanishi und von Oertzen für das $^{13}C+^{12}C$-System, daß eine Beschreibung in der Zwei-Zustands-Näherung nicht in der Lage ist, die Ausbildung kovalenter Moleküle zufriedenstellend wiederzugeben.

Deshalb wurden in dieser Arbeit für das System $^{13}C+^{12}C$ zusätzliche Messungen der elastischen und inelastischen Streuung durchgeführt. Das System $^{13}C+^{12}C$ bietet sich zur Untersuchung von Moleküleffekten an, weil ^{13}C aus einem ^{12}C-core mit abgeschlossener (1p3/2)-Schale und einem locker gebundenen Neutron besteht. Es handelt sich also um ein System aus zwei ^{12}C-cores und einem Valenzneutron.

Das System wurde mit Hilfe des CRC-Formalismus von B.Imanishi auf die Ausbildung kovalenter Kernmoleküle untersucht.

Um feststellen zu können, ob es auch in anderen Systemen zu solchen Moleküleffekten kommt, wurden für das $^{13}C+^{14}C$-System Messungen der elastischen Streuung, der inelastischen Anregung und der Neutronentranferkanäle durchgeführt. Die Meßergebnisse wurden mit Zwei-Stufen-EFR-DWBA-Rechnungen auf molekulare Effekte untersucht.

2. Das Experiment

2.1 Überblick

In der vorliegenden Arbeit sollten Winkelverteilungen der Neutronentransferkanäle und der inelastischen Streuung der Systeme $^{13}C+^{12}C$ und $^{13}C+^{14}C$ gemessen werden. Dazu wurde der in Fig.1 schematisch dargestellte experimentelle Aufbau verwendet. Der ^{13}C-Strahl (B) des Erlanger EN-Tandembeschleunigers wurde an der Streufolie (T) (^{14}C- bzw. ^{12}C-Targets) gestreut. Ein hinter der Streufolie montierter Faradaycup diente zur Normierung der Messungen. Eine weitere Normierungsmöglichkeit lieferte der Monitordetektor (M), der unter einem festen Winkel in der Streukammer eingebaut war. Eine Besonderheit stellt das Flugzeitteleskop dar, mit dem Masse und Energie der Reaktionsprodukte ermittelt werden. Es besteht aus dem Startdetektor (S) und dem Stopdetektor (D). Eine Massenidentifikation ist im vorliegenden Fall unbedingt nötig, weil sich die Reaktionsprodukte (^{12}C, ^{13}C, ^{14}C, ^{15}C) nicht in der Kernladung unterscheiden, und damit eine Teilchenidentifikation über eine dE/dx-Messung nicht möglich ist. Zur Messung verschiedener Streuwinkel θ kann das Flugzeitteleskop um die Targetfolie geschwenkt werden.

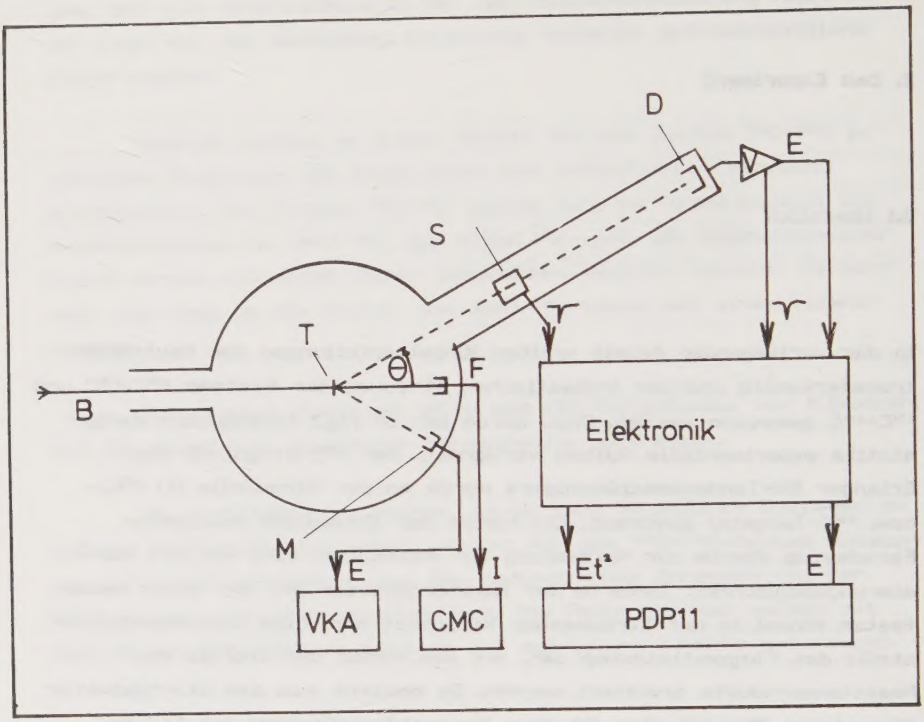


Fig.1: Experimenteller Aufbau (schematisch)

Die Bedeutung der Symbole ist:

B: Strahl	T: Target	S: Startdetektor
D: Stopdetektor	F: Faradaycup	M: Monitor
VKA: Vielkanalanalysator		CMC: Cupstromintegrator
PDP11: Computersystem PDP11/40		V: Vorverstärker
E: Energiesignal		Et^2: Massensignal $m \propto Et^2$
τ: schnelles Triggersignal		I: Cupstrom

2.2 Die Streukammer

Das Experiment wurde mit der in (2) beschriebenen Streukammer durchgeführt. Fig.2 zeigt die Streugeometrie. Das Flugzeitteleskop ist an dem drehbaren Oberteil der Kammer befestigt. Die Drehachse ist gegen die Senkrechte zum Strahl um 6° verkippt. Das Teleskop läßt sich auf einem Kegelmantel mit einem öffnungswinkel von 160° um diese Achse bewegen. Der Streuwinkel wird nach folgender Formel berechnet:

$$\theta_{LAB} = a\cos\left[\frac{\sqrt{tg^2 6^\circ - \cos^2\alpha \cdot \sin 6^\circ}}{\sqrt{\sin^2\alpha + tg^2 6^\circ}} \cdot \sin 10^\circ + \cos 10^\circ \cdot \cos 6^\circ \cdot \cos\alpha\right]$$

Dabei ist α der Winkel um den das Kammeroberteil mit dem Flugzeitteleskop gegen das Kammerunterteil verdreht ist. Die Kammer enthält weiter einen Drehteller, auf dem der Monitorzähler befestigt wurde. Der Faradaycup ist versenkbar und muß bei der Messung von Winkeln $\alpha < 8^\circ$ aus dem Strahlengang gefahren werden, weil sonst das Teleskop durch den Cup abgedeckt wird.

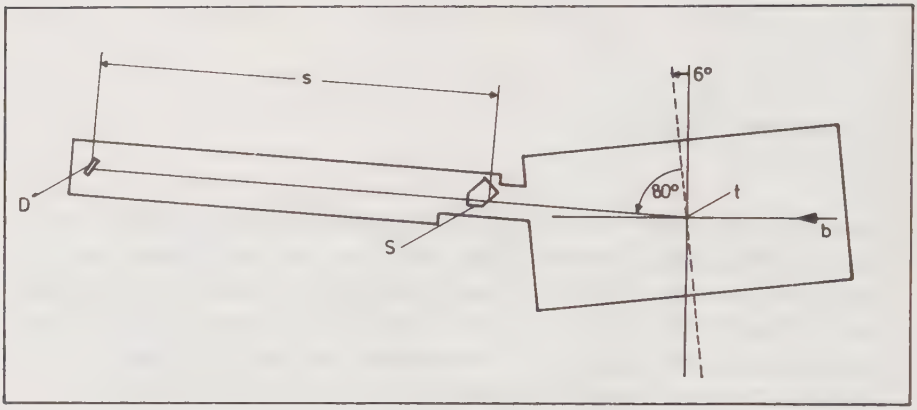


Fig.2: Geometrie der Streukammer und des Flugzeitteleskops:

Es bedeuten: b: Strahl t: Target
D: Stopdetektor S: Startdetektor
s: Flugstrecke

Die Drehachse ist um 6° gegen die Strahlachse gekippt, das Teleskop kann auf einem Kegelmantel mit öffnungswinkel 160° bewegt werden.

2.3 Das Flugzeitteleskop

Das Flugzeitteleskop ist in einem an das Oberteil der Kammer angeflanschten 4"-Rohr untergebracht (Fig.2). Es besteht aus dem Startdetektor (S) und dem Stopdetektor (D).

Der Aufbau des Startdetektors läßt sich Fig.3 entnehmen. Ein von links kommendes Schwerion schlägt aus der goldbedampften Mylarfolie (F) (Dicke 12 $\mu g cm^{-2}$) Sekundärelektronen heraus. Diese werden durch das zwischen Gitter (GR) und Folie liegende Potential von 1 kV auf eine Geschwindigkeit von 1,8 cm/ns beschleunigt und erreichen nach ca. 2 ns die kaskadierten Mikrokanalplatten C1 und C2 (4). An C1 und C2 liegt jeweils eine Spannung von 1 kV. Das ergibt eine Verstärkung von insgesamt 10^4. Die schließlich auf dem Auffänger auftreffende Elektronenlawine erzeugt über einen 50 Ω Widerstand Signalhöhen zwischen -0,3 und -1 V. Die Anstiegszeit der Signale beträgt weniger als 1 ns. Die benötigten Spannungen werden mit einem Spannungsteiler aus -3,5 kV (Fig.4) erzeugt.

Der Stopdetektor ist ein Oberflächensperrschichtzähler mit einer Fläche von 450 mm^2. Die Anstiegszeit beträgt 4-5 ns. Der Detektor wurde mit dem 1,5-fachen der vom Hersteller angegebenen Spannung betrieben. Dadurch verringert sich die Anstiegszeit um ca. 1 ns. Die Temperatur des Zählers wurde mit einer Kühleinrichtung auf 0°C gehalten. Dies verringert die Gefahr des Durchbrechens der Sperrschicht, was bei der angelegten Überspannung sonst möglich wäre.

Die Signale des Oberflächensperrschichtzählers sind der Teilchenenergie direkt proportional. Die Messung der Teilchenmasse basiert auf folgendem Prinzip (Fig.2):

Ein Ejektil der Masse m und der kinetischen Energie E löst in dem Startdetektor (S) und, nachdem es die Strecke s durchlaufen hat, in dem Stopdetektor (D) je einen Impuls aus. Der zeitliche Abstand t der beiden Impulse (Flugzeit) wird bestimmt. Es gilt:

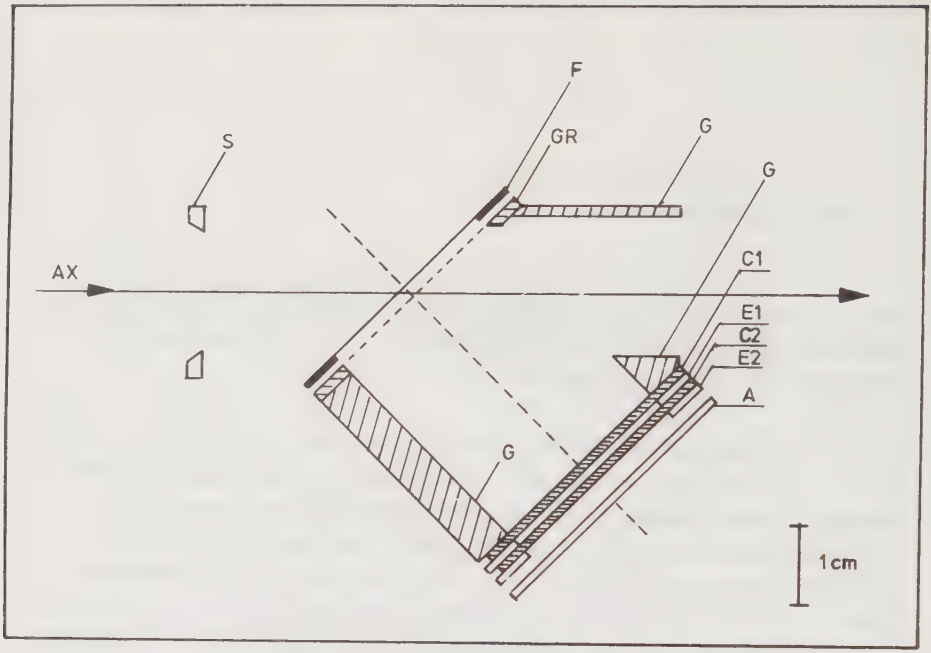


Fig.3: Aufbau des Startzählers:

Die Bedeutung der Symbole ist:

AX: Teleskopachse S: Blende

GR: Gitter G: Gehäuse

E1, E2: Elektoden für Mikrokanalplatten

F: Mylarfolie mit Gold bedampft

C1, C2: Mikrokanalplatten

A: Elektronenauffänger

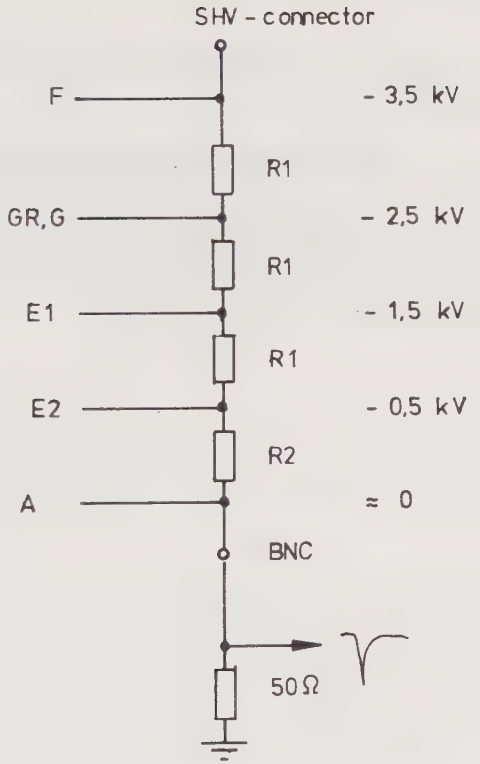


Fig.4: Spannungsteiler für den Startzähler:

Bedeutung der Symbole wie bei Fig.3. Der Spannungsteiler erzeugt alle benötigten Spannungen aus 3.5 kV.

$$m = \frac{2}{s^2} E t^2$$

Die Berechnung der Masse m aus der Energie E und der Flugzeit t übernimmt die nachgeschaltete Elektronik.

Ein Nachteil der Anordnung ist es, daß die Nachweiswahrscheinlichkeit des Startdetektors nicht für alle Teilchen 100% beträgt. Messungen mit der elastischen Streuung von Kohlenstoff an Gold ergaben jedoch unabhängig von der Energie (bei Energien > 5 MeV) Nachweiswahrscheinlichkeiten von mehr als 95%.

2.4 Elektronik und Datenaufnahme

Die Elektronik übernimmt folgende Aufgaben:

(i) Messung der Flugzeit
(ii) Verstärkung und Formung des Energiesignals
(iii) Berechnung der Masse aus Flugzeit und Energie
(iv) Aufbereitung des Energie- und Massensignals für die Rechenanlage

Fig.5 zeigt das Blockschaltbild. Der Vorverstärker (PA) des Siliziumdetektors erzeugt ein schnelles Signal (t) das auf kurze Anstiegszeit optimiert ist und ein zur Teilchenenergie proportionales Signal (E).

Der eingerahmte schnelle Teil der Elektronik übernimmt Aufgabe (i). Die schnellen Signale des Startdetektors bzw. des Silizium-zählers werden zunächst um den Faktor 4 verstärkt (FA). Die beiden constant-fraction-Module (CF) erzeugen ein Triggersignal (fast NIM). Dabei wird der Triggerzeitpunkt durch konstante Teilung des Input-signals von der Signalhöhe unabhängig festgelegt. Die Zeitmessung erfolgt im sogenannten Inversbetrieb. Das heißt: das an sich später entstehende Signal des Si-Detektors wird zum Starten der Zeitmessung verwendet. Das Startzählersignal wird um ca. 200 ns verzögert und dient als Stopsignal. Diese Technik ist sinnvoll, weil der Start-zähler, bedingt durch den größeren Raumwinkel, wesentlich mehr Sig-nale erzeugt als der Si-Detektor und im Normalbetrieb durch unnötig häufiges Starten der Zeitmessung eine erhöhte Totzeit des TAC erzeu-gen würde. Der TAC mißt den Zeitunterschied t zwischen beiden Sig-nalen und erzeugt ein zu t proportionales Ausgangssignal.

Die Aufgabe (ii) übernimmt der Vorverstärker (PA) und der Hauptver-stärker (MA).

Die Ausgangssignale des TAC ($\sim$t) und des Hauptverstärkers werden zur Massenberechnung verwendet (iii). Der Analogrechner TD4 (6) führt

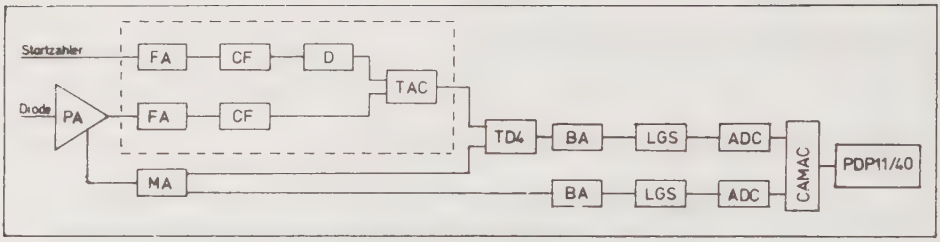


Fig.5: Flugzeit-Elektronik

Bedeutung der Symbole:

PA: Vorverstärker	FA: schneller Verstärker
CF: Constant Fraction	D: Kabeldelay
TAC: Time Amplitude Converter	TD4: Analogrechner
MA: Hauptverstärker	BA: Biased Amplifier
LGS: Linear Gate and Stretcher	ADC: Analog-Digital-Wandler

dabei folgende Rechenoperation aus:

$$M = v \cdot E(t_0 - t)^2$$

Dabei sind E und t die beiden Inputsignale. Die Parameter v und t_0 können mit Potentiometern eingestellt werden. t_0 dient zur Kompensation aller Verzögerungen (Delay 200 ns, interne Delays der Elektronik). Mit v kann die Höhe des Ausgangssignals (Masse) verändert werden.

Die nachfolgende Elektronik (iv) dient dazu, das jeweils interessante Energie-Massen-Gebiet auf den Eingangsbereich der ADC's (0V - 7V) abzubilden und die Signale gleichzeitig zu machen.

Zur Datenaufnahme stand das Programm ZDA (7) auf der PDP11/40 mit CAMAC-System zur Verfügung. Die Daten wurden auf Magnetband gespeichert. Die Auswertung konnte in der Regel nicht auf diesem System erfolgen, weil es ständig zur online-Datenaufnahme verwendet wird. Deshalb wurde für den gruppeneigenen Rechner (PDP11/23) das Auswerteprogramm DOUBLE entwickelt (8).

2.5 Nachweiswahrscheinlichkeit

Die Nachweiswahrscheinlichkeit (Efficiency) des Startdetektors ist von der Sekundärelektronenausbeute der goldbedampften Mylarfolie abhängig und damit eine Funktion der Teilchenenergie, Teilchenladung und der Folienqualität. Die Efficiency muß bei der Normierung berücksichtigt werden.

Zur Messug der Nachweiswahrscheinlichkeit sind zwei Verfahren anwendbar:

(i) Beim ersten Verfahren wird das Problem mit einer zusätzlichen Elektronik (Fig.6) gelöst. Mit einem Einkanaldiskriminator (TSCA) werden für ein eingestelltes Energiefenster aus den Diodensignalen (Efficiency = 1) Einheitsimpulse generiert. Diese werden zum einen von einem Counter (C1) gezählt, zum anderen als Gate-Impulse verwendet. Der TAC erzeugt an dem Ausgang "true stop" genau dann einen Einheitsimpuls, wenn nach einem Startimpuls ein Stopimpuls eingetroffen ist. Das Signal "true stop" ist also nur dann vorhanden, wenn der Startzähler das Teichen nachgewiesen hat. Um nur die true-stop-Signale zu zählen, die von Projektilen mit Energien in dem eingestellten Fenster erzeugt wurden, gated man die true-stop-Signale mit den Signalen des TSCA. Das Verhältnis der Zähler C2:C1 entspricht der Nachweiswahrscheinlichkeit. Ein Nachteil dieses Verfahrens ist es, daß über alle Teilchenmassen gemittelt wird. Dies führt dazu, daß bei Vorwärtswinkeln, wo die elastische Streung dominiert, zwar eine Efficiency von etwa 100% gemessen wird, bei Rückwärtswinkeln jedoch gewinnen auch leichte Teilchen (z.B. α-Teilchen und Protonen) an Bedeutung, deren Efficiency klein ist, und die Messung ergibt Werte um 50%. Es ist jedoch sicher nicht richtig diese zu geringen Durchschnittswerte zur Korrektur der Zählraten für die Massen 12, 13, 14 und 15 zu verwenden.

(ii) Bei diesem Verfahren wird eine spezielle Fähigkeit des Datenaufnahmeprogramms genutzt. Das Programm ZDA sortiert Ereignisse, die kein Massensignal erzeugen, in die Kanäle (E,0) auf die Grund-

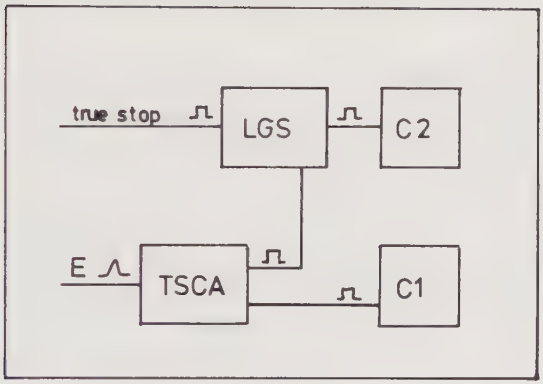


Fig.6: Elektronik zur Messung der Nachweiswahrscheinlichkeit

Es bedeuten:

TSCA: Einkanaldiskriminator
LGS: Linear Gate and Stretcher
C1, C2: gekoppelte Zähler
E: Energiesignal

linie ein (7). Man erhält so das Energiespektrum der Teilchen, die kein Signal im Startdetektor erzeugt haben. Der Untergrund der leichten Teilchen (es handelt sich meist um ein kontinuierliches Verdampfungsspektrum) kann subtrahiert werden.

Das Verfahren (ii) ergab für die in Frage kommenden Massen, Energien und Winkel Nachweiswahrscheinlichkeiten größer als 95%.

2.6 Der ^{13}C-Strahl

Die für den Einschuß in den Tandembeschleuniger benötigten negativen ^{13}C-Ionen wurden zum Teil in einer Duoplasmatron-Ionenquelle aus ^{13}CO-Gas, zum Teil in einer Sputterquelle (3) aus festem ^{13}C erzeugt. Bei Laborenergien zwischen 16 und 27.5 MeV wurden die Ladungskomponenten 3+ und 4+ verwendet. Wegen der besseren Fokussierbarkeit des Strahls wurde der Folienstripper nicht verwendet und bei allen Energien mit dem Gaskanal gestrippt. Der Brennfleck am Target wurde mit der z.B. in (7) beschriebenen Methode auf einen Durchmesser von weniger als 2 mm optimiert.

2.7 Targets

Die ^{12}C-Targets zur Messung der Reaktion $^{13}C+^{12}C$ wurden im Targetlabor des Physikalischen Instituts in Erlangen hergestellt. Die Targetdicken lagen zwischen 20 und 30 $\mu g/cm^2$.

Die für die Reaktion $^{13}C+^{14}C$ benötigten ^{14}C-Targets wurden uns freundlicherweise von Dr. H.J. Maier vom Targetlabor der Sektion Physik der Universität München gefertigt. Die Targetdicke betrug insgesamt 30 $\mu g/cm^2$. Der ^{12}C-Anteil lag bei 30%. Dies wurde durch eine Targetanalyse mit ^{13}C-Rückstreung bei einem Streuwinkel von 35°(Labor) und 10 MeV Laborenergie ermittelt. Während der Messungen lagerte sich zusätzlich ^{12}C aus dem Restgas an. Dadurch wurde der störende Untergrund aus $^{13}C+^{12}C$-Reaktionen größer. Die Targets wurden deshalb an verschiedenen Stellen beschossen.

2.8 Kinematik, Spektren

Fig.7 zeigt ein zweidimensionales Spektrum der Reaktion $^{13}C+^{12}C$ bei θ_{LAB} = 37° und E_{LAB} = 20.6 MeV. Nach rechts ist die Energie, und nach oben die Masse aufgetragen.

Beim System $^{13}C+^{14}C$ sind die Spektren komplizierter (Fig.10), weil wegen des ^{12}C-Anteils von ca. 30% im ^{14}C-Target das $^{13}C+^{12}C$-Spektrum als Untergrund auftritt. Fig. 8 u. 9 kann man entnehmen bei welchen Laborwinkeln sich die Reaktionsprodukte mit den Massen 12 und 13 aus der Reaktion $^{13}C+^{14}C$ energetisch von denen der Reaktion $^{13}C+^{12}C$ trennen lassen. Ein zusätzlicher Untergrund in den Massenlinien 12 und 13 entsteht bei Vorwärtswinkeln durch die niederenergetische Flanke des Peaks der elastischen Streuung. Soweit es möglich war, wurde beim System $^{13}C+^{14}C$ die Messung mit Hilfe der Rückstoßteilchen (Massen 14 und 15) durchgeführt.

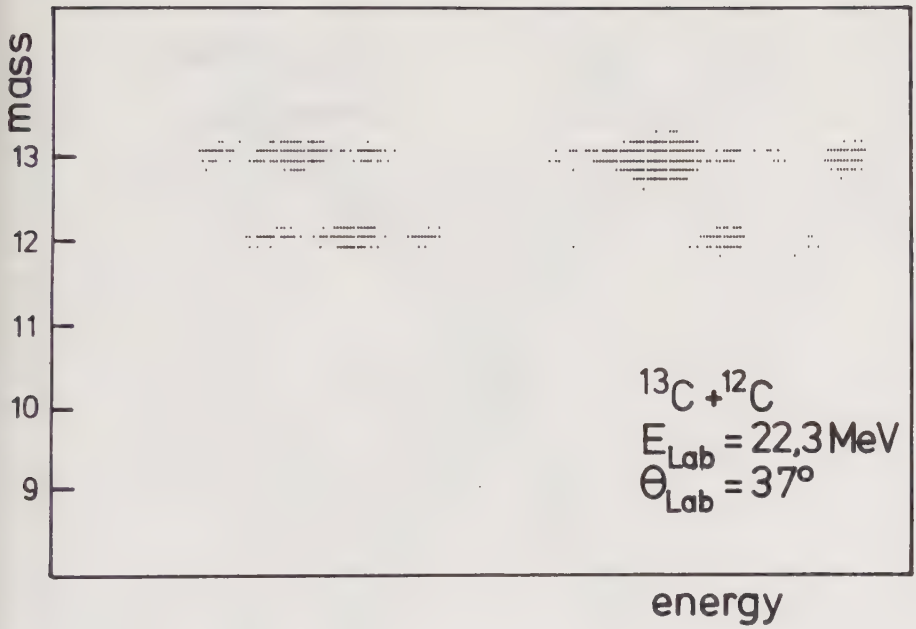


Fig.7: Zweidimensionales Energie-Massen-Spektrum der Reaktion $^{13}C+^{12}C$

Der starke Peak in der Masse 13 entspricht der elastischen Streuung. Die beiden Dreiergruppen in der linken Hälfte des Spektrums stammen aus der der inelastischen Streuung (von rechts nach links ^{13}C(3.088 MeV), ^{13}C(3.854 MeV), ^{12}C(4.44 MeV))

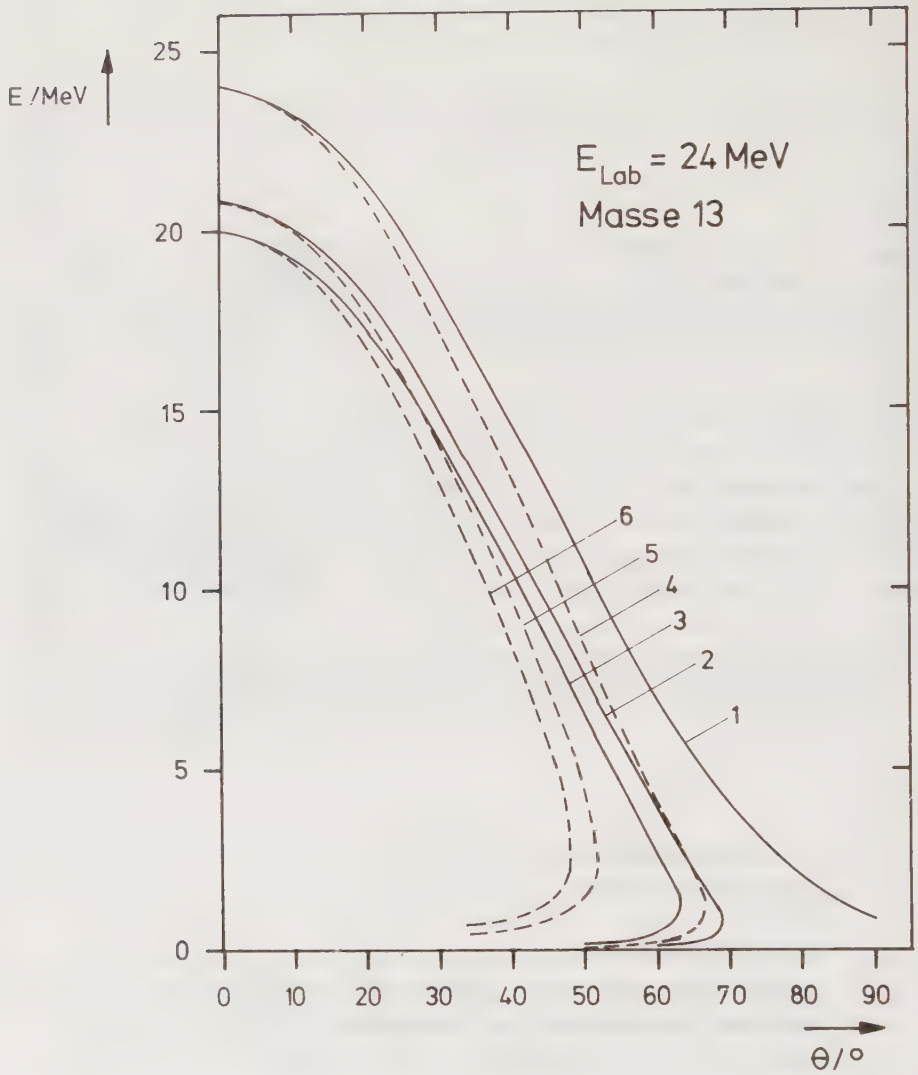


Fig.8: Laborenergie über dem Laborwinkel für Reaktionsprodukte der Masse 13 aus den Reaktionen $^{13}C+^{12}C$ und $^{13}C+^{14}C$.

Die durchgezogenen Linien entsprechen den $^{13}C+^{14}C$-Reaktionen, die gestrichelten den $^{13}C+^{12}C$-Reaktionen. Die Symbole bedeuten:

1: $^{14}C(^{13}C,^{13}C)^{14}C$
2: $^{14}C(^{13}C,^{13}C(3.088\ MeV))^{14}C$
3: $^{14}C(^{13}C,^{13}C(3.854\ MeV))^{14}C$
4: $^{12}C(^{13}C,^{13}C)^{12}C$
5: $^{12}C(^{13}C,^{13}C(3.088\ MeV))^{12}C$
6: $^{12}C(^{13}C,^{13}C(3.854\ MeV))^{12}C$

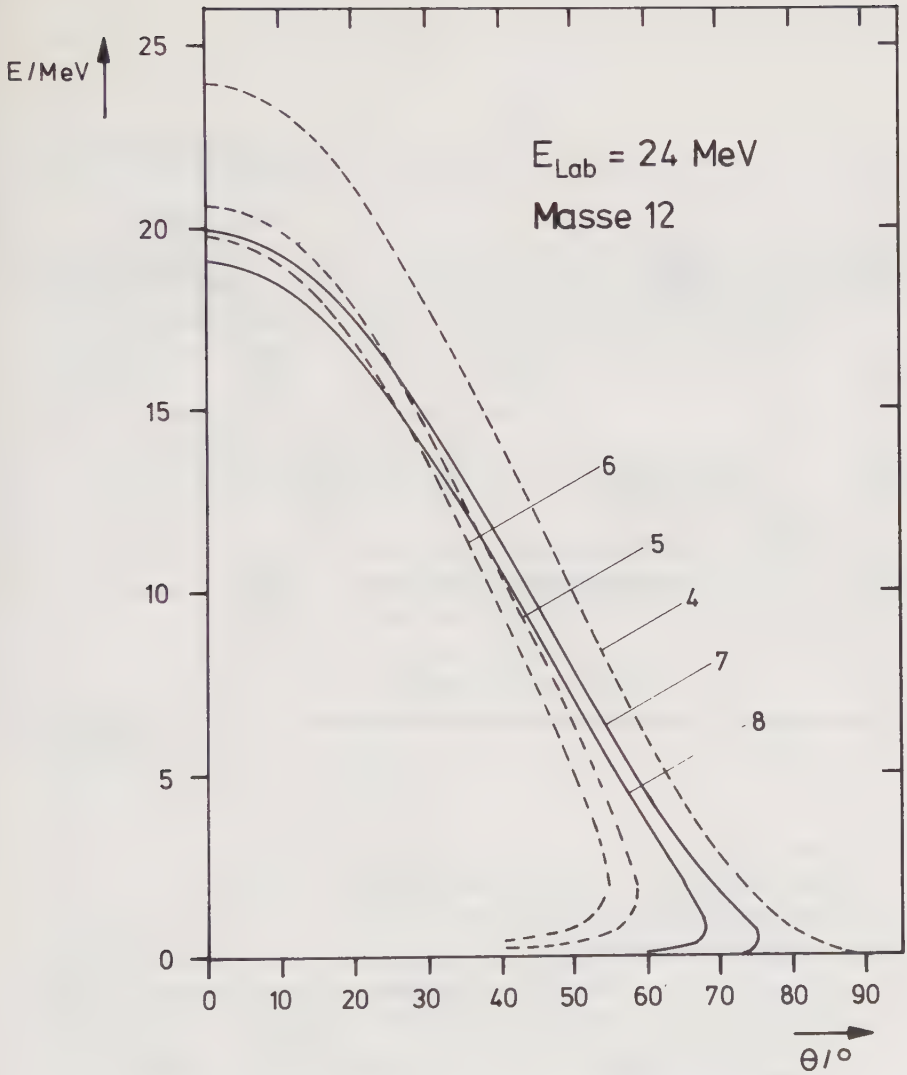


Fig.9: Laborenergie über dem Laborwinkel für Reaktionsprodukte der Masse 12 aus den Reaktionen $^{13}C+^{12}C$ und $^{13}C+^{14}C$.

Die durchgezogenen Linien entsprechen den $^{13}C+^{14}C$-Reaktionen, die gestrichelten den $^{13}C+^{12}C$-Reaktionen.

4: $^{12}C(^{13}C,^{13}C)^{12}C$

5: $^{12}C(^{13}C,^{13}C(3.088\ MeV))^{12}C$

6: $^{12}C(^{13}C,^{13}C(3.854\ MeV))^{12}C$

7: $^{14}C(^{13}C,^{12}C)^{15}C(gs)$

8: $^{14}C(^{13}C,^{12}C)^{15}C(0.74\ MeV)$

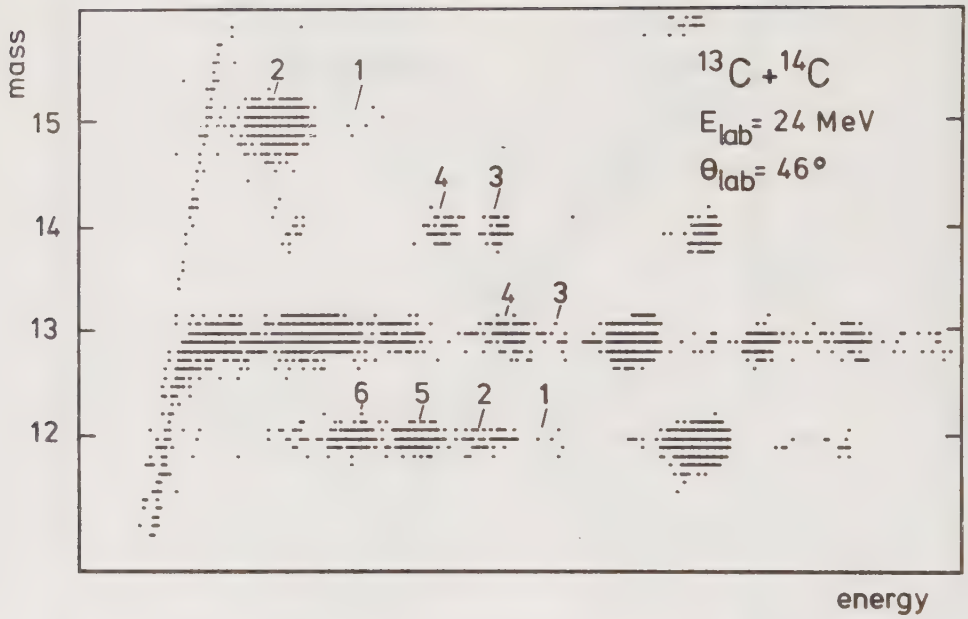


Fig.10: Zweidimensionales Energie-Massen-Spektrum der Reaktion $^{13}C+^{14}C$:

Die Symbole bezeichnen folgende Reaktionen:

1: $^{14}C(^{13}C,^{12}C)^{15}C$(gs)
2: $^{14}C(^{13}C,^{12}C)^{15}C$(0.74 MeV)
3: $^{14}C(^{13}C,^{13}C$(3.088 MeV))^{14}C
4: $^{14}C(^{13}C,^{13}C$(3.854 MeV))^{14}C
5: $^{12}C(^{13}C,^{13}C$(3.088 MeV))^{12}C
6: $^{12}C(^{13}C,^{13}C$(3.854 MeV))^{14}C

2.9 Normierung

Zur Normierung wurde ein Faraday-Cup und ein Silizium-Oberflächensperrschichtzähler ($\theta_{Lab} = 30^{o}$) verwendet. Ein Auswerteprogramm (8) wurde entwickelt, um die Daten bereits während der Strahlzeit normieren und graphisch darstellen zu können. Dabei wurde wie folgt verfahren:

Der Wirkungsquerschnitt berechnet sich zu

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}(\theta) = \frac{N \cdot R}{I \cdot A \cdot \Delta\Omega}$$

mit

N	Anzahl der Reaktionsprodukte pro Meßlauf	
A	Anzahl der Targetatome pro Fläche	
R	Verhältnis der Raumwinkel zwischen Schwerpukt- und Laborsystem	
$\Delta\Omega$	Raumwinkel des Detektors	
I	Anzahl der Projektile pro Meßlauf	

$$I = \frac{I_{el}}{q \cdot f_s \cdot e}$$

I_{el}	Cupstrom,	q	Projektilladung
f_s	Nachstripfaktor,	e	Elementarladung

Weiter gilt für die im Monitordetektor nachgewiesene Anzahl N_{MONI} an Reaktionsprodukten (z.B. elastische Streuung):

$$N_{MONI} = \frac{d\sigma}{d\Omega}(\theta_{MONI}) \cdot I \cdot A \cdot \Delta\Omega_{MONI} / R_{MONI}$$

Daher ist

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{N \cdot R}{N_{MONI} \Delta\Omega} \cdot \frac{d\sigma}{d\Omega}(\theta_{MONI}) \cdot \Delta\Omega_{MONI} / R_{MONI}$$

$$= \frac{N \cdot R}{N_{MONI}} \cdot F \qquad F = \frac{d\sigma}{d\Omega}(\theta_{MONI}) \cdot \frac{\Delta\Omega_{MONI}}{\Delta\Omega} / R_{MONI}$$

Der Faktor F läßt sich zu

$$F = \frac{q \cdot f_s \cdot e}{A \cdot \Delta\Omega} \cdot \frac{N_{MONI}}{I_{el}}$$

berechnen. Das Verhältnis $\frac{N_{MONI}}{I_{el}}$ wurde jeweils über alle Meßpunkte, bei denen das gleiche Target verwendet wurde und die Energie gleich war, gemittelt. Die Flächendichte erhält man aus der Targetanalyse. Den Nachstripfaktor kann man aus (1) entnehmen.

Das Auswerteprogramm berechnet den Ausdruck

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{N \cdot R}{N_{MONI}} \cdot F$$

Der Faktor F muß vorher berechnet und eingeben werden.

2.10 Experimentelle Ergebnisse

Die Figuren 11-13 zeigen die für das System $^{13}C+^{12}C$ gemessenen Winkelverteilungen bei E_{cm}= 7.80, 8.30, 8.84, 9.88 und 10.7 MeV. Die Fehlerbalken entsprechen den statistischen Fehlern. Dort, wo keine Fehlerbalken eingezeichnet sind, ist der statistische Fehler kleiner als die Datenpunkte.

Die inelastische Streuung des Kanals ^{13}C(3.854 MeV)+^{14}C konnte energetisch nicht von der des Kanals ^{13}C(3.67 MeV)+^{14}C getrennt werden. Die Daten repräsentieren daher in diesem Fall die Summe der beiden Wirkungsquerschnitte. Der Zustand ^{13}C(3.67 MeV) mit J =3/2$^-$ hat die Konfiguration $^{12}C(2^+)+(1p1/2)$. Bei Einschußenergien bis E_{cm}= 9.88 MeV ist der Ausgangskanal $^{13}C+^{12}C(2^+)$ nahezu nicht vorhanden. Man kann davon ausgehen, daß der Kanal $^{13}C+^{12}C$(3.67 MeV) wegen des ähnlichen Anregungsmechanismus von $^{12}C(2^+)$ und $^{13}C(3/2^-)$ vergleichbar geringe Wirkungsquerschnitte liefert. Deshalb wurde der Beitrag des $^{13}C(3/2^-)$-Zustandes zum Wirkungsquerschnitt bei Energien bis E_{cm}= 9.88 MeV vernachlässigt.

Figuren 14-18 zeigen die für das System $^{13}C+^{14}C$ gemessenen Winkelverteilungen bei E_{cm}= 10.37, 11.40, 12.44 und 14.26 Mev. Unterschiedliche Symbole entsprechen verschiedenen Messungen. Da die CM-Energien gegenüber denen des $^{13}C+^{12}C$-Systems relativ hoch sind, muß mit einem gewissen Anteil des $^{13}C(3/2^-)$-Zustandes am Wirkungsquerschnitt des $^{13}C(5/2^+)$-Kanals gerechnet werden. Dies wird dadurch bestätigt, daß bei E_{cm}=10.7 MeV der $^{12}C(2^+)$-Zustand im Spektrum des Systems $^{13}C+^{12}C$ auftritt(Fig.7). Deshalb wurden beim System $^{13}C+^{14}C$ diese Winkelverteilungen bei den Modellrechnungen nicht verwendet.

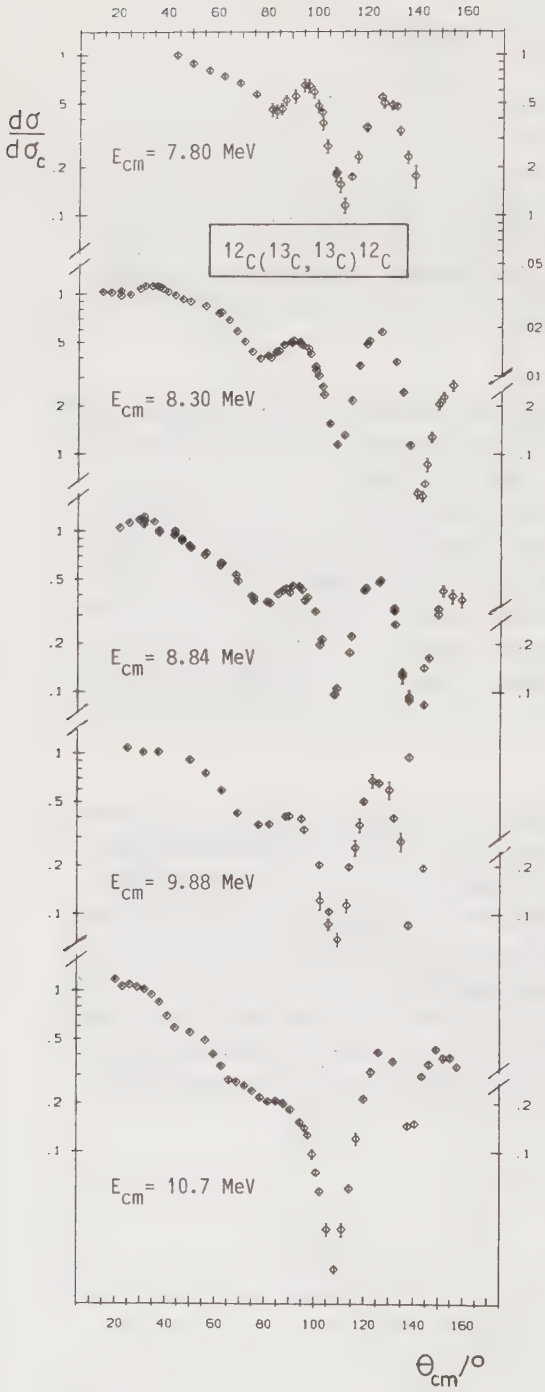


Fig.11:

Winkelverteilungen der elastischen Streuung beim System $^{12}C+^{13}C$.

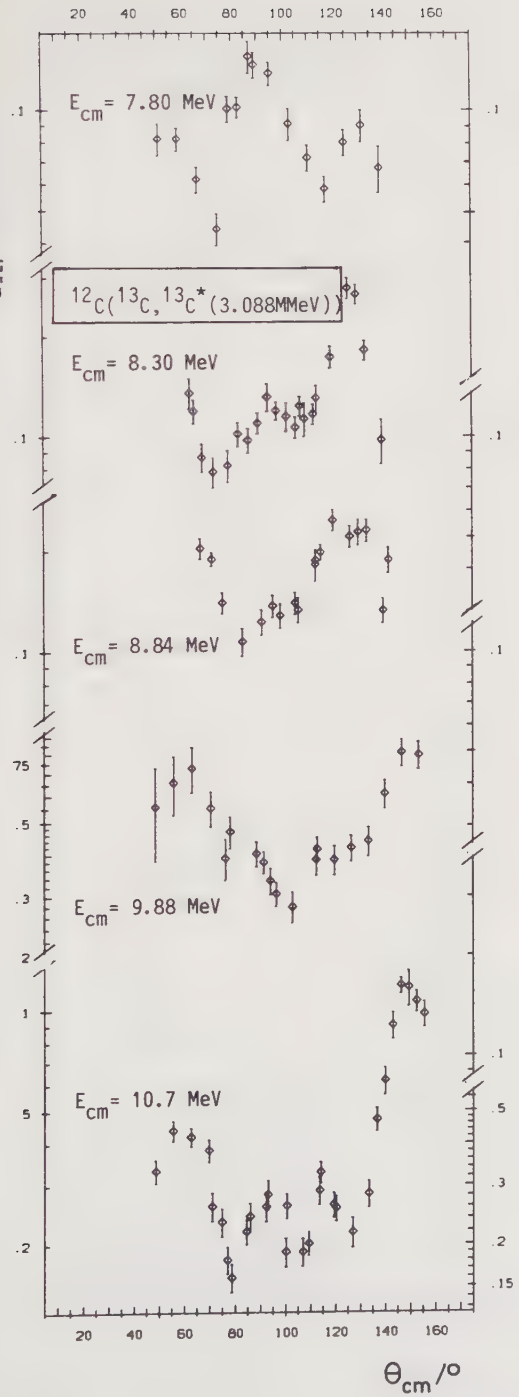


Fig.12:

Winkelverteilungen der inelastischen Streuung $^{12}C(^{13}C,^{13}C(3.088\ MeV))$

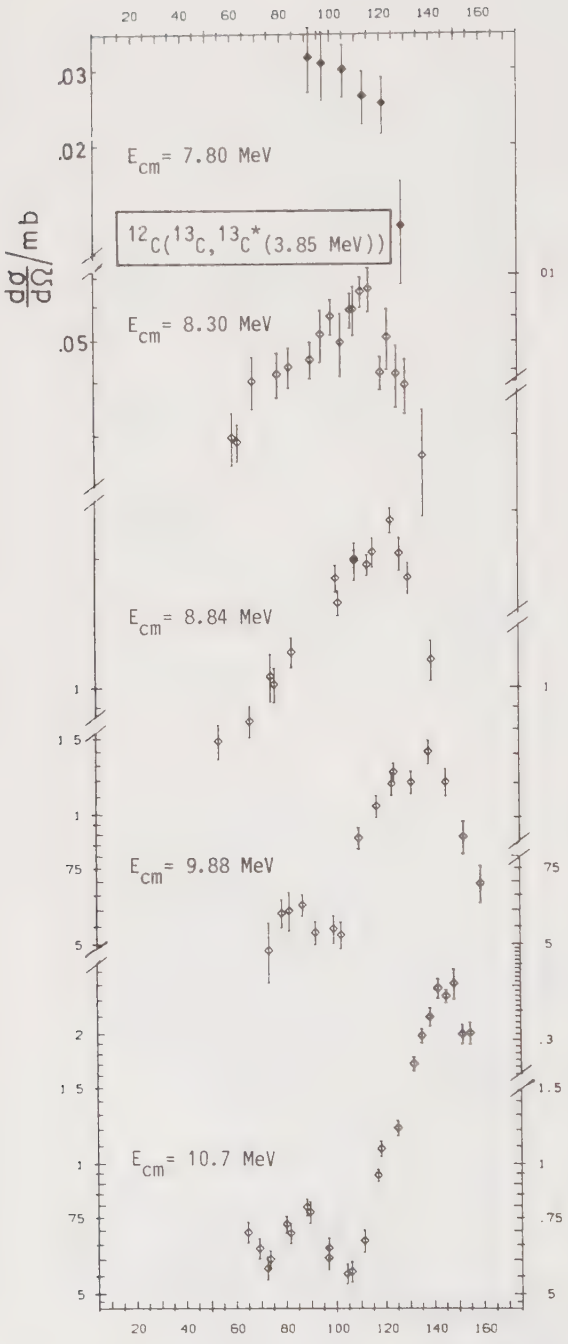


Fig.13:

Winkelverteilungen der inelastischen Streuung $^{12}C(^{13}C,^{13}C(3.854\ MeV))$

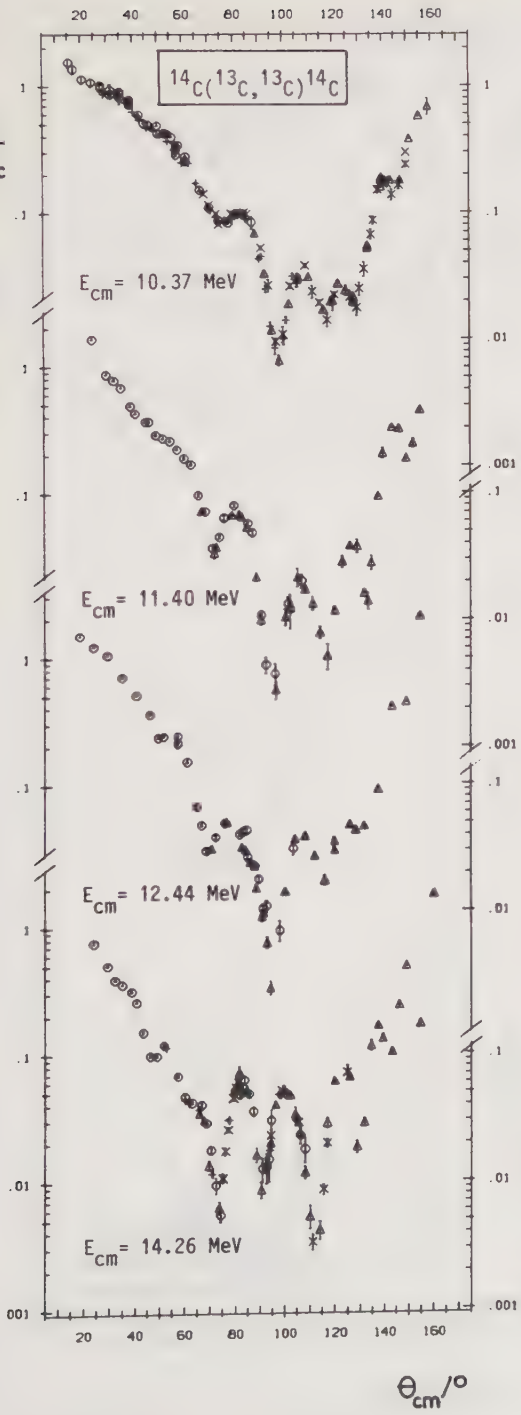


Fig. 14:

Winkelverteilungen der elastischen Streuung bei $^{13}C+^{14}C$. Verschiedene Symbole entsprechen verschiedenen Messungen.

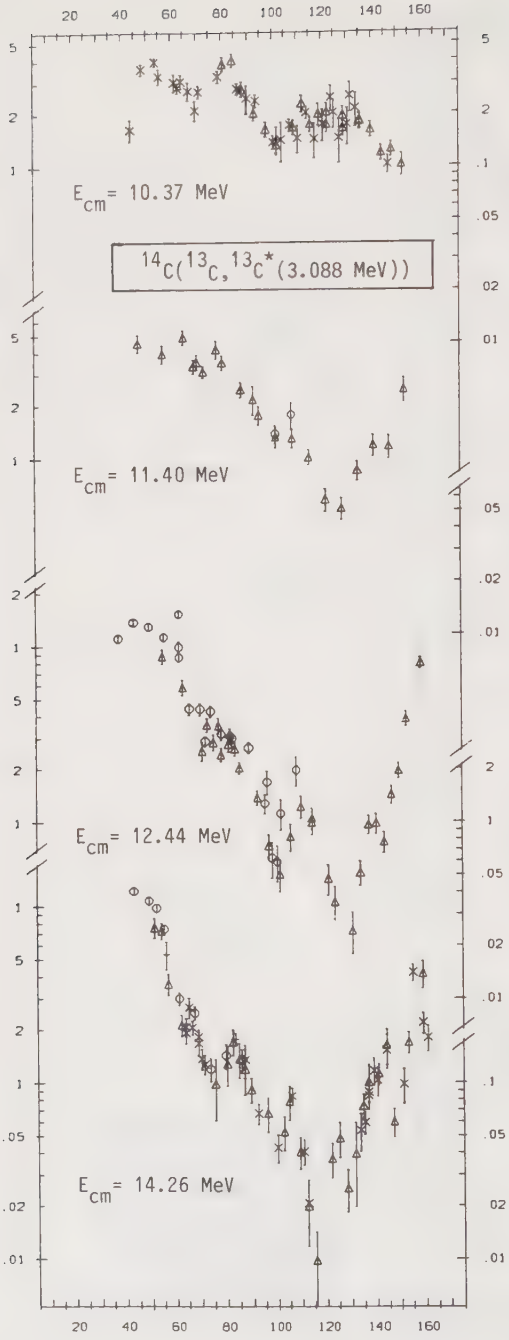


Fig.15:

Winkelverteilungen der inelastischen Streuung $^{14}C(^{13}C,^{13}C(3.088\ MeV))$

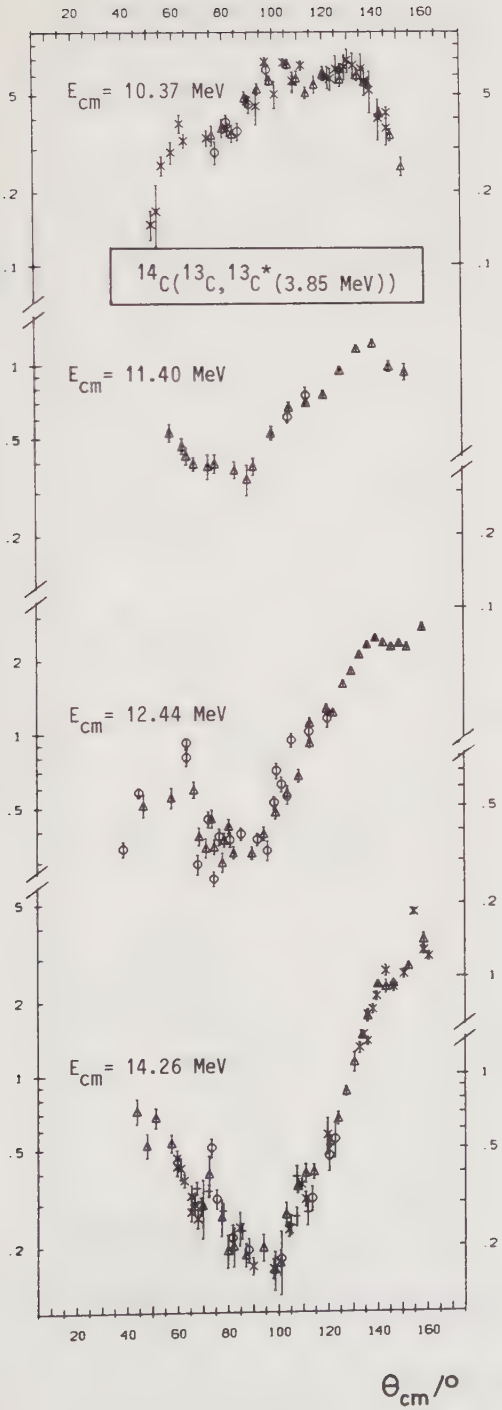


Fig.16:

Winkelverteilungen der inelastischen Streuung $^{14}C(^{13}C, ^{13}C(3.854\ MeV))$

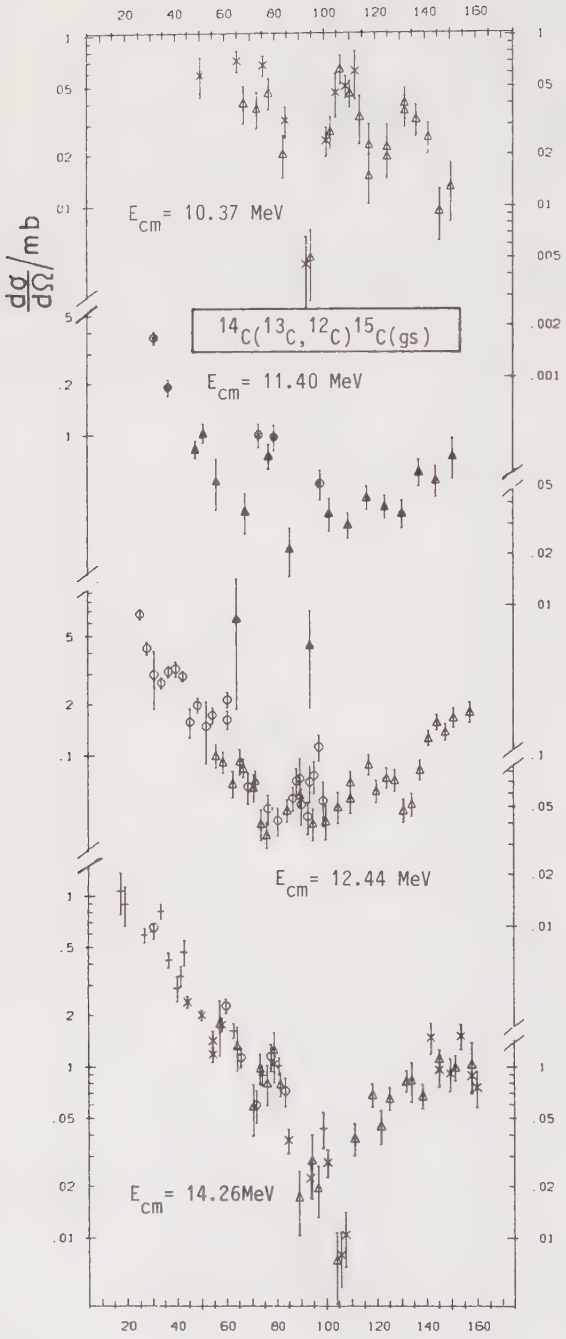


Fig.17:

Winkelverteilungen der Transferreaktion $^{14}C(^{13}C,^{12}C)^{15}C(gs)$

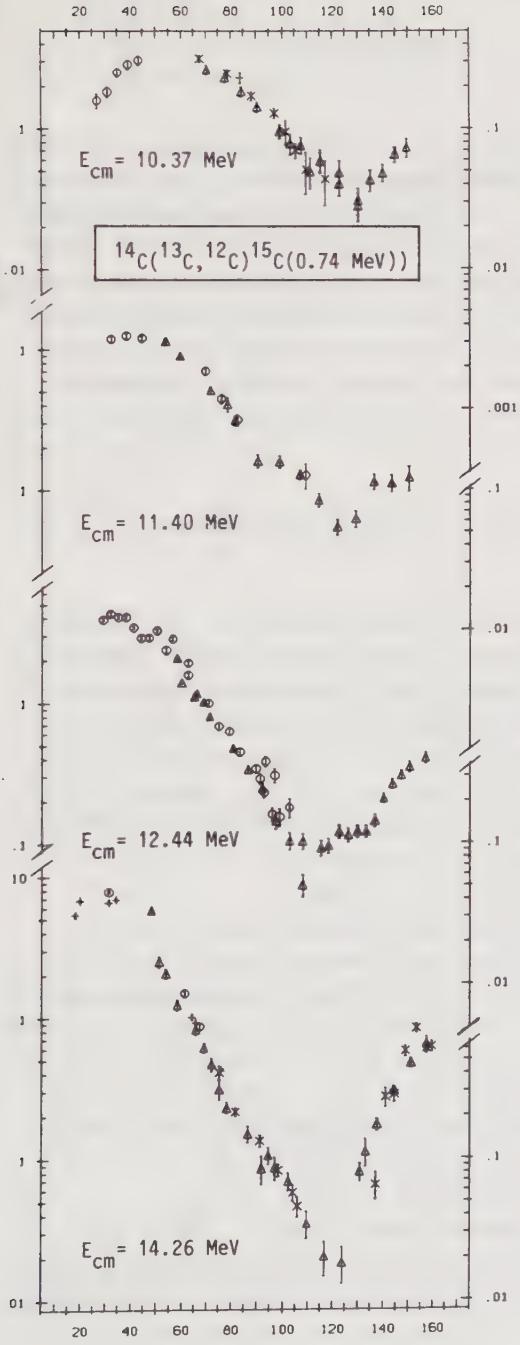


Fig.18:

Winkelverteilungen der Transferreaktion $^{14}C(^{13}C,^{12}C)^{15}C(0.74\ MeV)$

3. Theoretische Grundlagen

Zur theoretischen Beschreibung der $^{13}C+^{12}C$-Daten stand der CRC-Code von B. Imanishi (Ref.9,10) zur Verfügung. Dieser wird in den Punkten 3.1 (CRC-Formalismus) und 3.2 (RMO-Modell) beschrieben. Obwohl dieser Code bei der Beschreibung von Moleküleffekten große Vorteile gegenüber üblichen CRC- bzw. DWBA-Methoden bietet, konnte er beim System $^{13}C+^{14}C$ nicht verwendet werden, weil er nur für identische cores ausgelegt ist. Deshalb wurde für $^{13}C+^{14}C$ das Zwei-Stufen-DWBA-Programm Jupiter-V (Ref.11,12), das von H.Wolter zur Verfügung gestellt worden war, verwendet (Kap. 3.3).

3.1 CRC-Formalismus

Zur Beschreibung von molekularen Effekten bietet der im folgenden behandelte CRC-Formalismus, der von B. Imanishi entwickelt wurde (Ref. 9,10), einige wesentliche Vorzüge (CRC: Coupled Reaction Channel):

(i) Nichtorthogonalitätsterme werden bis zur ersten Ordnung berücksichtigt. übliche CRC-Codes berücksichtigen solche Terme nur bei Ein- und Zweistufenrechnungen.

(ii) Die gekoppelten Gleichungen sind bei Imanishi bezüglich der post- und prior-Darstellung symmetrisch, man kann deshalb davon ausgehen, daß die verwendete norecoil-Näherung geringe Auswirkungen auf das Ergebnis der Rechnungen hat.

(iii) Durch die Symmetrisierung für identische cores erhält man Molekülwellenfunktionen (LCNO-Darstellung).

Der Formalismus verwendet folgende Näherungen:

(i) Zur Reduzierung des Rechenaufwandes werden die nichtlokalen Formfaktoren durch eine lokale Näherung berechnet.

(ii) Transfers und inelastische Anregungen zwischen den cores werden wie üblich vernachlässigt.

Das Programm ist auf die Beschreibung identischer Systeme beschränkt. Die Zusammenhänge werden zunächst jedoch für den allgemeinen Fall (nichtidentische cores) dargestellt.

In Ref.10 wird zwischen zwei Darstellungen der Kanalbasisfunktionen $\hat{\Phi}_i$, $\hat{\Phi}_\alpha$ unterschieden:

Bei der Partial Wave Representation (PWR) werden die $\hat{\Phi}_i$ in einem Koordinatensystem, dessen z-Achse mit der Strahlrichtung übereinstimmt, dargestellt.

$$\hat{\Phi}_i^{JM\Pi}(\hat{r}_{mi}, 12R^i) = \left[Y_{l_i}(\hat{r}_{mi}) \otimes \varphi_{I_i}(12R^i) \right]_{JM} (1+(-)^{\Pi+\pi_i+l_i}) \frac{1}{2} \qquad (3.1.1)$$

Dabei ist r_{mi} der Abstandsvektor der Kerne im Kanal i (Fig.19a) ($\hat{r}_{mi}$ bedeutet Einheitsvektor in Richtung von r_{mi}) und l_i der Bahndrehimpuls der Relativbewegung. $\varphi_{I_i}(12R^i)$ setzt sich aus den intrinsischen Wellenfunktionen der beiden cores 1 und 2 und aus den Wellenfunktionen der Valenznukleonen mit den Koordinaten $R^i = (R_1, \ldots\ldots, R_m)$ (Fig.19a) zusammen. I_i ist der Kanalspin und π_i die Kanalparität. J und Π geben den Gesamtdrehimpuls und die Gesamtparität an.

In der Helicity Representation (HR) verwendet man zur Darstellung der $\hat{\Phi}_\alpha$ ein Koordinatensystem, bei dem die Molekülachse (Verbindungslinie der cores) zur z-Achse wird. Diese Achse rotiert während des Streuprozesses.

$$\hat{\Phi}_\alpha^{JM\Pi}(\hat{r}_{m\alpha}, \underline{12R^\alpha}) = \frac{1}{\sqrt{2(1+\delta_{K0})}} \frac{\hat{J}}{\sqrt{4\pi}} \left\{ D^J_{MK}(\hat{r}_{m\alpha})\, \varphi_\alpha(\underline{12R^\alpha}) + \right. \qquad (3.1.2)$$
$$\left. + s_\alpha\, D^J_{M-K}(\hat{r}_{m\alpha})\, \varphi_{-\alpha}(\underline{12R^\alpha}) \right\}$$

$r_{m\alpha}$ ist der Abstandsvektor der Kerne im Kanal α . k stellt die Projektion des Drehimpulses des Valenzorbitals auf die rotierende z-Ach-

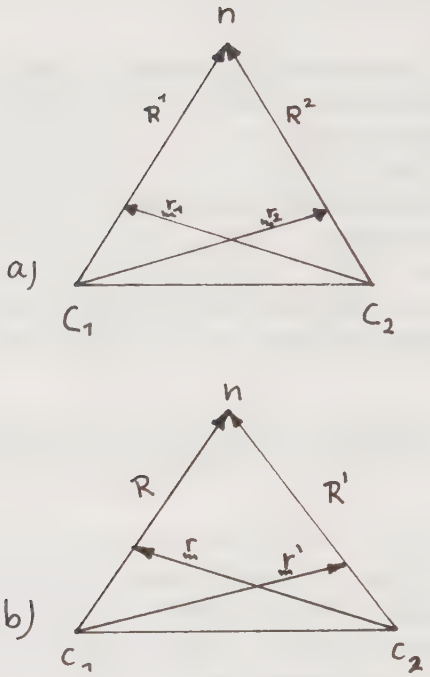


Fig.19: Koordinaten für a) verschiedene cores C1 ≠ C2
b) identische cores C1 = C2
n : Valenznukleon C1: core 1 C2: core 2

se dar. φ_α ($\underline{12R}^\alpha$) ist die Wellenfunktion der intrinsischen Koordinaten $R^\alpha = (R_1, \ldots, R_m)$ im rotierenden Koordinatensystem. $\varphi_{-\alpha}$ ist wie φ_α definiert, jedoch mit umgekehrtem Vorzeichen der k-Quantenzahl. D^J_{MK} ist die Drehmatrix. Außerdem wurden folgende Abkürzungen verwendet:

$$\hat{J} = J(J+1) \qquad s_\alpha = (-)^{J+\Pi+\pi_\alpha+I_\alpha}$$

Die $\hat{\Phi}_\alpha$ lassen sich in die $\hat{\Phi}_i$ durch

$$C^{J\Pi}_{\alpha i} = \langle \hat{\Phi}^{JM}_\alpha, \hat{\Phi}^{JM}_i \rangle \qquad (3.1.3)$$

transformieren. Dabei gilt

$$C^{J\Pi}_{\alpha i} = 0$$

für verschiedene Massenpartitionen in Kanal α und i

In beiden Darstellungen sind die Quantenzahlen bis auf k und l_i gleich. In der HR übernimmt k die Funktion von l_i in der PWR. Die PWR wurde in dieser Arbeit für die exakten CRC-Rechnungen verwendet. Die HR kommt beim RMO-Modell zur Anwendung.

Im folgenden wird zwischen PWR und HR nicht mehr explizit unterschieden und deshalb nur noch der Index α (auch für i) verwendet. Eine weitere Darstellung der Kanalbasisfunktionen im Raum aller Koordinaten $\mathfrak{S}$ ist:

$$\langle \mathfrak{S} | \alpha r_\alpha \rangle = \delta(r_\alpha - r'_\alpha)\, \hat{\Phi}_\alpha(\hat{r}_{m\alpha}, 12R^\alpha) / r_\alpha \qquad (3.1.4)$$

mit $\mathfrak{S} = (r'_\alpha, \hat{r}_{m\alpha}, 12R^\alpha), (r'_\beta, \hat{r}_{m\beta}, 12R^\beta), \ldots$

Der Hamiltonoperator des Gesamtsystems wird folgendermaßen zerlegt:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2\mu_\alpha r_\alpha} \frac{\partial}{\partial r_\alpha}\left(r_\alpha^2 \frac{\partial}{\partial r_\alpha}\right) + \frac{\hbar^2}{2\mu_\alpha r_\alpha^2} L^2(\hat{r}_{m\alpha}) + H_0^\alpha + V_{cc} + V^\alpha \qquad (3.1.5)$$

mit H_0^α Hamiltonian der inneren Freiheitsgrade

$$H_0^\alpha \hat{\Phi}_\alpha = \varepsilon_\alpha \hat{\Phi}_\alpha \tag{3.1.6}$$

$L(\underline{r}_{\alpha})$ Drehimpulsoperator der Relativbewegung

V_{cc} core-core-Wechselwirkung

V^α Wechselwirkung zwischen Valenznukleon und jeweils anderem core

Nun kann man folgende Matrizen definieren:

$$N_{\alpha\beta}(r_\alpha, r_\beta) = \langle \alpha r_\alpha | \beta r_\beta \rangle = \int d\tau \left(\hat{\Phi}_\alpha \delta(r_\alpha - r_\alpha')/r_\alpha\right)^* \left(\hat{\Phi}_\beta \delta(r_\beta - r_\beta')/r_\beta\right) \tag{3.1.7}$$

$N_{\alpha\beta}$ sind die Überlappintegrale der im allgemeinen nicht orthogonalen Zustände $|\alpha r_\alpha\rangle$ und $|\beta r_\beta\rangle$.

$$L_{\alpha\beta}(r_\alpha, r_\beta) = \int d\tau \left(\hat{\Phi}_\alpha \delta(r_\alpha - r_\alpha')/r_\alpha\right)^* V_{cc} \left(\hat{\Phi}_\beta \delta(r_\beta - r_\beta')/r_\beta\right) \tag{3.1.8}$$

$$K_{\alpha\beta}(r_\alpha, r_\beta) = \int d\tau \left(\hat{\Phi}_\alpha \delta(r_\alpha - r_\alpha')/r_\alpha\right)^* V^\alpha \left(\hat{\Phi}_\beta \delta(r_\beta - r_\beta')/r_\beta\right) \tag{3.1.9}$$

$$U^c_{\alpha\alpha'} = L_{\alpha\alpha'} \tag{3.1.8b}$$

$$V_{\alpha\alpha'} = K_{\alpha\alpha'} \tag{3.1.9b}$$

für identische Massenpartition in Kanal α und α'

Die Wechselwirkungen $U^c_{\alpha\alpha'}$ und $V_{\alpha\alpha'}$ sind die sogenannten "direkten Wechselwirkungen". Sie erzeugen inelastische Anregungen und sind für Hybridisierungseffekte bei den Valenzorbitalen verantwortlich.

Mit den Abkürzungen

$$(RN)_{\alpha\beta} = \frac{\hbar^2}{2\mu_\alpha r_\alpha^2} \langle \alpha r_\alpha | L^2 | \beta r_\beta \rangle \tag{3.1.10}$$

$$t_{\alpha\beta} = -\frac{\hbar^2}{2\mu_\alpha} \frac{d^2}{d r_\alpha^2} \delta_{\alpha\beta} \delta(r_\alpha - r_\beta) \tag{3.1.11}$$

$$\varepsilon_{\alpha\beta} = \varepsilon_\alpha \delta_{\alpha\beta} \tag{3.1.12}$$

erhält man für $\langle \alpha r_\alpha | H | \beta r_\beta \rangle$:

$$\langle \alpha r_\alpha | H | \beta r_\beta \rangle = \left((t+R+\varepsilon)N + K + L \right)_{\alpha\beta} \qquad (3.1.13)$$

Zerlegt man den Hamiltonoperator (3.1.5) nach Kanal β so wird (3.1.13) zu:

$$\langle \alpha r_\alpha | H | \beta r_\beta \rangle = \left(N(t+R+\varepsilon) + K^T + L \right)_{\alpha\beta} \qquad (3.1.14)$$

Der Index ^{T} bedeutet transponiert.
Addition von (3.1.13) und (3.1.14) führt zu Symmetrie bezüglich post- und prior-Darstellung.

$$\langle \alpha r_\alpha | H | \beta r_\beta \rangle = \frac{1}{2} \Big(N(t+R+U^D+\varepsilon) + \\ + (t+R+U^D+\varepsilon)N + K + K^T + 2L - U^D N - N U^D \Big)_{\alpha\beta} \qquad (3.1.15)$$

$$\text{mit} \qquad U^D = U^C + V$$

Zu den Basisfunktionen $\hat{\phi}_\alpha$ existiert ein Satz von orthogonalen Funktionen ϕ_α der asymptotisch mit den $\hat{\phi}_\alpha$ übereinstimmt:

$$\phi_\alpha(r_\alpha, \xi) = \sum_\beta \hat{\phi}_\beta(\hat{r}_{m\beta}, 12R^\beta)\, N^{-1/2}_{\beta\alpha}(r_\beta, r_\alpha)\, r_\alpha / r_\beta \qquad (3.1.16)$$

Die totale Wellenfunktion $\bar{\Psi}(\xi)$ wird nach dieser Basis entwickelt:

$$\bar{\Psi}(\xi) = \sum_\alpha \int dr'\, \phi_\alpha(r'_\alpha, \xi)\, u_\alpha(r'_\alpha) / r'_\alpha \qquad (3.1.17)$$

Mit

$$K^t = \frac{1}{2} N^{-1/2} \left(K + K^T + 2L - N U^D - U^D N \right) N^{-1/2} \qquad (3.1.18)$$

$$\Delta M = \left[N^{-1/2}, \left[(t+R+U^D+\varepsilon), N^{1/2} \right] \right] \qquad (3.1.19)$$

erhält man

$$\langle \phi_\alpha, H \phi_\beta \rangle = \left((t+R+U^D+\varepsilon) + K^t + \Delta M \right)_{\alpha\beta} \qquad (3.1.20)$$

und die gekoppelten Gleichungen:

$$\left(E - (T + R + U^0 + \varepsilon + K^+ + \Delta M) \right) \underline{u}_m = 0 \qquad (3.1.21)$$

mit $\underline{u}_m = (u_1(r_1), \ldots\ldots, u_n(r_n))$

Die Wechselwirkung ΔM wird nun vernachlässigt, weil sie nur Beiträge zweiter Ordnung des Operators $N^{(1)}$ enthält.

$$N^{(1)} = N - I \qquad (3.1.22)$$

K^+ enthält dagegen nur Beiträge nullter Ordnung. Damit werden trotz der Näherung $\Delta M = 0$ Nichtorthogonalitätsterme bis zur ersten Ordnung berücksichtigt.

Die Matrix $K^+_{\alpha\beta}(r_\alpha, r_\beta)$ ist nicht lokal. Sie kann aber durch eine Reihenentwicklung in lokale Matrizen

$$K^+_{\alpha\beta}(r_\alpha, r_\beta) = \sum_n (-)^n K^{(n)}_{\alpha\beta}(r) \Big/ a^{n-1}_{\alpha\beta} \qquad (3.1.23)$$

und Vernachlässigung aller Terme außer für n=0 lokal approximiert werden.

$$K^+_{\alpha\beta}(r_\alpha, r_\beta) \approx K_{\alpha\beta}(r_\alpha)$$

Diese Näherung ist gültig, wenn Bindungs- und Projektilenergie klein sind. Der Koeffizient $a_{\alpha\beta}$ wird wegen der geforderten Symmetrie der Entwicklung (3.1.23) bezüglich der post-prior-Darstellung so gewählt, daß die Gerade

$$r_\alpha = a_{\alpha\beta}\, r_\beta$$

die Winkelhalbierende des von den Geraden

$$r_\alpha = \frac{m + M_\beta}{M_\beta}\, r_\beta \quad \text{und} \quad r_\alpha = \frac{M_\alpha}{m + M_\alpha}\, r_\beta$$

eingeschlossenen Winkels bildet. Dabei ist

m	die Masse des transferierten Nukleons,
M_α, M_β	Massen der Residuen in Kanal α, β

Für $^{13}C+^{12}C$ ist $a_{\alpha\beta} = 1$.

Damit werden die gekoppelten Gleichungen zu:

$$\left\{ E - \left[t_\alpha(r_\alpha) + R_\alpha(r_\alpha) + \varepsilon_\alpha \right] \right\} u_\alpha(r_\alpha) =$$

$$= \sum_\beta U^D_{\alpha\beta}(r_\alpha)\, u_\beta(r_\alpha) + \sum_\beta a^{-1}_{\alpha\beta}\, K^0_{\alpha\beta}(r_\alpha/a_{\alpha\beta})\, u_\beta(r_\alpha/a_{\alpha\beta}) \qquad (3.1.24)$$

Im folgenden wird der CRC-Formalismus für den Spezialfall der $^{13}C+^{12}C$-Streuung beschrieben. Bei diesem System hat man es mit zwei identischen cores und einem Valenznukleon zu tun. Daher muß die Basisfunktion (3.1.4) durch Anwendung des Operators

$$\left(1 + (-)^A P_{12} / \sqrt{2}\right)$$

symmetrisiert werden, wobei A die Anzahl der Nukleonen in einem core ist. Der Operator P ergibt auf r bzw. R angewandt (Fig.19b):

$$\underset{m}{r}'_\alpha = P_{12}\, \underset{m}{r}_\alpha \qquad \underset{m}{R}^{\alpha'} = P_{12}\, \underset{m}{R}^\alpha$$

In der norecoil-Näherung gilt: $\underset{m}{r}'_\alpha = -\underset{m}{r}_\alpha$

Man erhält für die Basis-Wellenfunktionen im Kanal α :

$$\bar{\phi}(\alpha r_\alpha, \mathfrak{r}) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\hat{\phi}_\alpha(\hat{\underset{m}{r}}_\alpha, 12R^\alpha) + (-)^{A+\Pi+\pi_\alpha}\, \hat{\phi}_\alpha(\hat{\underset{m}{r}}_\alpha, 21R^{\alpha'}) \right) \delta(r_\alpha - r^0_\alpha)/r'_\alpha$$

$$\left(\mathfrak{r} = (r^0_\alpha, \hat{\underset{m}{r}}_\alpha, 12R^\alpha) = (r^0_\alpha, \hat{\underset{m}{r}}'_\alpha, 12R^{\alpha'})\right.$$

Π Gesamtparität

π_α Kanalparität

In der HR erhält man

$$\bar{\phi}(\alpha r_\alpha, \mathfrak{r}) = \frac{1}{\sqrt{2(1+\delta_{K0})}} \cdot \frac{\hat{J}}{\sqrt{4\pi}} \left\{ D^{J*}_{MK}(\hat{r}_\alpha) \cdot \bar{\Psi}_{\Pi\alpha} + s_\alpha D_{M-K}(\hat{r}_\alpha) \cdot \bar{\Psi}_{\Pi-\alpha} \right\} \cdot$$

$$\cdot\, \delta(r_\alpha - r^0_\alpha)/r_\alpha$$

mit

$$\psi_{\pi\alpha} = \left(\varphi_\alpha(12R^\alpha) + (-)^{A+\pi-\pi_\alpha} \varphi_\alpha(21R^{\alpha'}) \right) / \sqrt{2} \qquad (3.1.25)$$

Diese Wellenfunktion beschreibt im körperfesten System ein Valenznukleon in einem Molekülorbital, das durch Überlagerung der Orbitale der beiden Kerne entsteht (LCNO). Man erhält also durch die Symmetrisierung Basisfunktionen, die bereits die Eigenschaften von Moleküorbitalen haben.

Die symmetrisierten Wellenfunktionen und damit auch die Matrixelemente $L_{\alpha\beta}$, $K_{\alpha\beta}$ und $N_{\alpha\beta}$ enthalten sowohl direkte, als auch core-exchange-Beiträge. D.h. bei norecoil-Näherung ergibt sich für die Operatoren aus (3.1.8) bis (3.1.10):

$$\begin{aligned} N &= I + (-)^A \hat{N} \\ L &= U^C + (-)^A \hat{L} \\ K &= V + (-)^A \hat{K} \end{aligned} \qquad (3.1.26)$$

mit

$$\begin{aligned} \hat{N}_{\alpha\beta}(r,r') &= \int d\tau\, \phi_\alpha^*(\hat{r}_m, 12R)\, \phi_\beta(\hat{r}_m', 21R') \\ \hat{L}_{\alpha\beta}(r,r') &= \int d\tau\, \phi_\alpha^*(\hat{r}_m, 12R)\, V_{CC}\, \phi_\beta(\hat{r}_m', 21R') \\ \hat{K}_{\alpha\beta}(r,r') &= \int d\tau\, \phi_\alpha^*(\hat{r}_m, 12R)\, V_\alpha\, \phi_\beta(\hat{r}_m', 21R') \end{aligned} \qquad (3.1.27)$$

Die symmetrisierten gekoppelten Gleichungen erhält man indem man in (3.1.21) die Operatoren N, L und K, die den Operator K^+ bilden (siehe 3.1.18) durch $\hat{N}$, $\hat{L}$ und $\hat{K}$ ersetzt.

Beim System $^{13}C+^{12}C$ werden folgende Näherungen gemacht:

(i) $$2L - (NU^c + U^cN) = 0 \qquad (3.1.28)$$

D.h. es gibt keine Transfers zwischen den cores.
K^+ wird zu

$$K^+ = 1/2\, N^{-1/2}(K + K^T - NV - VN)N^{-1/2} \qquad (3.1.29)$$

(ii) Core-core-Anregungen durch die Wechselwirkungen V_{cc} und V^{α} werden venachlässigt.

(iii) k-mixing-Effekte in den Operatoren K und N als Folge der norecoil-Näherung werden vernachlässigt.

(iv) $$(U^c)_{\alpha\beta} = V_{cc}\,\delta_{\alpha\beta}$$

Die Streumatrix $T_{\alpha\beta}$ erhält man durch die Randbedingung:

$$u^{J\pi(+)}_{\alpha\beta}(r) \longrightarrow f_\alpha(r)\delta_{\alpha\beta} - \pi h^{(+)}_\alpha(r)\, T^{J\pi}_{\alpha\beta} \qquad (3.2.31)$$

mit

$$f_\alpha = \sqrt{\frac{2\mu_\alpha}{\pi\hbar^2}} \times F_{L_\alpha}\,, \quad h^{(+)}_\alpha = \sqrt{\frac{2\mu_\alpha}{\pi\hbar^2}} \times H^{(+)}_{L_\alpha}$$

mit F_{L_α} reguläre Coulombwellenfunktionen

$H^{(+)}_{L_\alpha}$ auslaufende Coulombwellenfunktionen

3.2 Rotating Molecular Orbital Modell

Bei diesem Modell geht man davon aus, daß die Wechselwirkungen in den Gekoppelte-Kanäle-Gleichungen lokal sind, und daß die Geschwindigkeit der Kerne wesentlich geringer als die mittlere Geschwindigkeit der der Nukleonen ist (Adiabatische Näherung). Diese Bedingung ist für Energien in der Nähe des Coulombwalles erfüllt. Die in Ref.10 im Rahmen des CRC-Formalismus (Kap.3.1 (HR)) definierten "Rotierenden Molekülorbitale" hängen nur vom relativen Abstand der Kerne ab. Die Rotationskopplung, die den Winkelanteil der Relativbewegung erzeugt, ist in den Molekülfunktionen enthalten. Dies unterscheidet die RMO vom Zwei-Zentren-Schalenmodell (14). k-mixing-Effekte, die vom Rückstoß und von impulsabhängigen Kräften herrühren, werden bei der Definition der Molekülwellenfunktionen ebenfalls berücksichtigt.

Beim Rotating Molekular Orbital Modell wird die Helicity Representation (HR) zur Beschreibung der Kanalbasisfunktionen gewählt.

Die gekoppelten Gleichungen haben für den Fall, daß nur zwei Kanäle (m und n) für den Streuprozeß von Bedeutung sind, folgende Gestalt:

$$\left\{ E - \left[\tilde{\tilde{t}}(r) + \tilde{\tilde{R}}(r) + \tilde{\tilde{U}}^{0}(r) + \tilde{\tilde{\varepsilon}} + \tilde{\tilde{K}}^{0}(r) \right] \right\} \tilde{\underline{u}}(r) = 0 \quad (3.2.1)$$

mit $\tilde{\underline{u}}(r) = (u_m(r), \tilde{u}_n(r))$

$$\tilde{\tilde{K}}^{0}(r) = \begin{bmatrix} 0 & K_{mn}(r) \\ K^{0}_{nm}(r) & 0 \end{bmatrix}$$

$$\tilde{\tilde{\varepsilon}}(r) \quad \begin{bmatrix} \varepsilon_m & 0 \\ 0 & \varepsilon_n + (1 - a_{nm})E \end{bmatrix}$$

$\tilde{\tilde{t}}$, $\tilde{\tilde{R}}$ analog

Dieser Zusammenhang läßt sich für mehrere (N_m:N_n) Kanäle in den Massenpartitionen m und n durch Vergrößerung der Dimensionen obiger Matrizen verallgemeinern.

Die Wechselwirkung

$$U^{tot}(r) = \tilde{R}(r) + \tilde{U}^{D}(r) + \tilde{K}^{t}(r) + \tilde{\mathcal{E}}$$

kann durch den Operator A(r) diagonalisiert werden.

$$V_p(r) = \left(A^{-1}(r)\, U^{tot}(r)\, A(r)\right)_{PP}$$

Das auf diese Weise erzeugte "Adiabatische Potential" $V_p(r)$ gibt die Einteilchenenergie in den rotierenden Molekülorbitalen als Funktion des Abstandes an. Die Transformation A(r) stimmt asymptotisch mit der Transformation zwischen den Kanalbasisfunktionen der PWR und HR überein.

Die RMO-Basisfunktionen

$$\Phi_p = \sum_i \phi_i\, A_{ip}(r)$$

sind durch die neue Quantenzahl p gekennzeichnet.

$$p = 1,2,\ldots\ldots,n$$

Beim System $^{13}C+^{12}C$ gilt dabei folgender Zusammenhang zwischen der Quantenzahl p des Molekülzustandes und den asymptotischen Zuständen:

$$P = 1 \xrightarrow[r\to\infty]{} {}^{13}C(1/2^-)+{}^{12}C \qquad p = 3,4,5 \xrightarrow[r\to\infty]{} {}^{13}C(5/2^+)+{}^{12}C$$

$$p = 2 \xrightarrow[r\to\infty]{} {}^{13}C(1/2^+)+{}^{12}C$$

Die CRC-Gleichungen im RMO-Modell erhält man durch Multiplikation der Gleichung

$$E - \left(\tilde{T} + U^{tot}\right)\underline{\tilde{u}}(r) = 0$$

mit $A^{-1}(r)$ von links und durch Einfügen des Operators $I=AA^{-1}$ zwischen

$E-(\tilde{t}+U^{tot})$ und die Relativwellenfunktion $\underset{\sim}{\tilde{u}}(r)$:

$$E - \left\{ \tilde{f}(r) + U_p(r) + A^{-1}(r) \left[\tilde{f}(r), A(r) \right] \right\} V(r) = 0$$

mit $\underset{\sim}{v}(r) = A^{-1} \underset{\sim}{\tilde{u}}(r)$

Übergänge zwischen verschiedenen p-Zuständen werden durch die Wechselwirkung $A^{-1}[\tilde{t},A]$ erzeugt (radiale Kopplung).

$$\left(A^{-1}(r) \left[\tilde{f}(r), A(r) \right] \right)_{pq} = \Delta U_{pq}^{(1)}(r) \frac{d}{dr} + \Delta U_{pq}^{(2)}(r) = \Delta U_{pq}$$

mit

$$\Delta U_{pq}^{(1)}(r) = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \left(\sum_\alpha A_{\alpha p}(r) \frac{d}{dr} A_{\alpha q}(r) \right) \frac{d}{dr}$$

$$\Delta U_{pq}^{(2)}(r) = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \left(\sum_\alpha A_{\alpha p}(r) \frac{d^2}{dr^2} A_{\alpha q}(r) \right)$$

Unter der Bedingung $\Delta U_{pq}(r) << \left| U_p(r) - U_q(r) \right|$

gilt für die DWBA-Übergangsamplitude erster Ordnung

$$T_{pq} = T_p^0 \delta_{pq} + \left\langle v_p^{(0-)}, A^{-1} \left[t, A \right] v_q^{(0+)} \right\rangle$$

wobei $v_p^{(0-)}$ und $v_q^{(0+)}$ Lösungen der CRC-Gleichung ohne die radiale Kopplung sind. Die Indizes $-$ und $+$ bedeuten einlaufende bzw. auslaufende Wellen als Randbedingung.

3.3 Zwei-Stufen-EFR-DWBA

Der Code JUPITER V von H. Wolter geht auf Tamura und Udagawa zurück. Die Rechnung wird mit Exact-Finite-Range-Formfaktoren durchgeführt. Recoil-Effekte werden also exakt berücksichtigt. Die gekoppelten Gleichungen werden in zweiter Ordnung DWBA gelöst. Da nicht erwartet werden kann, daß beim Auftreten von Moleküleffekten die Born'sche Reihe bereits in der zweiten Ordnung konvergiert, können starke molekulare Effekte durch die Rechnung nicht wiedergegeben werden.

Den im folgenden kurz umrissenen Exact-Finite-Range-DWBA-Formalismus findet man in Ref.11 und 12. Man betrachtet die Reaktion A(a,b)B. Mit den intrinsischen Wellenfunktionen $|\Psi_{s_b m_b}\rangle$ bzw. $|\Psi_{I_B M_B}\rangle$ (s_b, I_B sind die Gesamtbahndrehimpulse von b, B, m_b bzw. M_B die zugehörigen z-Komponenten), der Relativkoordinate r_b und der Radialwellenfunktion $\chi_{\beta\alpha}(r_b)$ führt man die Kanalbasisfunktionen ein:

$$\phi_\beta = r_b^{-1}\, \chi_{\beta\alpha}(r_b)\, Y_{l m_b}(\hat{r}_b)\, |\Psi_{s_b m_b}\rangle |\Psi_{I_B M_B}\rangle \qquad (3.3.1)$$

damit läßt sich die totale Wellenfunktion schreiben als:

$$\Psi_\alpha^{(+)} = \sum_\beta \phi_\beta \qquad (3.3.2)$$

Diese Funktion muß die Schrödingergleichung erfüllen

$$(E - H)\, \Psi_\alpha^{(+)} = 0 \qquad (3.3.3)$$

Der Hamiltonoperator läßt sich auf folgende Art zerlegen:

$$H = T_\beta + U_\beta + H_\beta + V_\beta \qquad (3.3.4)$$

mit T_β kinetische Energie der Relativbewegung

U_β optisches Potential im Kanal β

H_β Hamiltonian der intrinsischen Koordinaten

$$H_\beta |\Psi_{s_b m_b}\rangle |\Psi_{I_B M_B}\rangle = E_\beta |\Psi_{s_b m_b}\rangle |\Psi_{I_B M_B}\rangle$$

V_β Rest der Wechselwirkung

Mit $D_\beta = E - E_\beta - T_\beta - U_\beta$ (3.3.5)

erhält man die gekoppelten Gleichungen in folgender Gestalt:

$$D_\beta \chi_{\beta\alpha}(r_b) = \begin{cases} \sum_{\gamma \neq \beta} \mathcal{J} \int r_c dr_c \left[(\beta | V_\beta | \gamma) - D_\beta (\beta | \gamma) \right] r_b \chi_{\gamma\alpha}(r_c) & \text{(post)} \\ \sum_{\gamma \neq \beta} \mathcal{J} \int r_c dr_c \left[(\beta | V_\gamma | \gamma) - (\beta | \gamma) D_\gamma \right] r_b \chi_{\gamma\alpha}(r_c) & \text{(prior)} \end{cases} \quad (3.3.6)$$

Dabei führt die Zerlegung des Hamiltonian (3.3.4) zur post-Darstellung. Die prior-Darstellung erhält man durch Zerlegung im Kanal γ:

$$H = T_\gamma + U_\gamma + H_\gamma + V_\gamma \quad (3.3.7)$$

D_γ ist wie D_β definiert. $\mathcal{J}$ ist die Jakobideterminante.

Die Gleichung 3.3.6 wird nicht exakt gelöst sondern durch eine DWBA genähert. Bei DWBA erster Stufe hat man auf der RHS von 3.3.6 nur den Kanal $\gamma = \alpha$

$$\chi_{\gamma\alpha}(r_c) = \chi_\alpha(r_a) \quad (3.3.12)$$

mit

$$D_\alpha \chi_\alpha(r_a) = 0 \quad (3.3.13)$$

χ_α ist die "Distorted Wave" im Kanal α.

Mit 3.3.13 läßt sich sofort einsehen, daß der Nichtorthogonalitätsterm $(\beta|\gamma)D_\gamma$ in 3.3.6 in der prior-Form verschwindet. Multipliziert man die post-Form mit D_β^{-1} von links, so wird die Nichtorthogonalität durch den Faktor $(\beta|\gamma)$ bestimmt. Dieser Faktor wird asymptotisch zu:

$$(\beta|\gamma) = N(r_b, r_c) \xrightarrow[r_b \to \infty]{} 0 \quad (3.3.14)$$

Bei Ein-Stufen-DWBA-Rechnungen gibt es deshalb keine Beiträge durch Nichtorthogonalitätsterme. Bei Zwei-Stufen-DWBA-Rechnungen wird der erste Schritt in prior-Form gerechnet. Dabei verschwindet wie oben

der Nichtorthogonalitätsterm. Die zweite Stufe rechnet man in der post-Form. Der Nichtorthogonalitätsterm verschwindet asymptotisch.

Bei Zwei-Stufen-DWBA-Rechnungen muß also die Reihenfolge prior-post eingehalten werden, wenn man Nichtorthogonalitätseffekte in der Rechnung vermeiden will. Für höhere Ordnungen der DWBA läßt sich eine Verfälschung der Ergebnisse durch diese Effekte nicht vermeiden.

Bei der eigentlichen Rechnung wird die folgende Gleichung numerisch gelöst:

$$D_\beta(r_b)\,\chi_\beta^{(i)}(r_b) = J\int dr_c\, r_c\, r_b\, (\beta|V|\gamma)\,\chi_\gamma^{(i-1)}(r_c) \qquad (3.3.15)$$

$i = 1$ oder 2

$V = V_\gamma$ für $i=1$, $V = V_\beta$ für $i=2$

Gleichung 3.3.15 wird iterativ gelöst. Als Lösung 0-ter Ordnung verwendet man $\chi^{(0)}$ aus 3.3.13. Die Streumatrix erhält man durch die Bedingung 3.2.31.

Zur Beschreibung der inelastischen Einteilchenanregung verwendet H.Wolter folgende Zusammenhänge (Ref.20):

Man betrachtet die Streuung eines Kerns a, der aus einem core c und dem Valenzteilchen v besteht, an einem strukturlosen Kern A. Die Zustände von a können in der Form:

$$\phi_\alpha = \phi_c^\alpha\, \psi_c$$

angeschrieben werden (Der core c soll nicht angeregt werden). ψ_c ist die Wellenfunktion von c und ϕ_c^α die Wellenfunktion des Valenzteilchens v. Die Wechselwirkung V_{aA} zwischen a und A wird unter Vernachlässigung bestimmter Mehrteilcheneffekte zu

$$V_{aA} = V_{cA} + V_{vA}$$

genähert. V_{cA} ist die Wechselwirkung zwischen core c und A, V_{vA} ist die Wechselwirkung zwischen dem Valenzteilchen v und A. V_{cA} wird durch das empirische optische Potential, das die Streuung von c an A

beschreibt, approximiert. Die Wellenfunktion des Valenzteilchens V kann entwickelt werden nach (auf Antisymmetrisierung und Drehimpulskopplungen soll hier nicht eingegangen werden):

$$\phi_c^{\alpha} = \sum_q a_{cq}^{\alpha}\, \phi_q(r_{vc})$$

Die ϕ_q sind orthonormalisierte Einteilchenzustände, die Koeffizienten a_{cq}^{α} sind die spektroskopischen Amplituden.

Nun nimmt man an, daß V_{vA} durch das Potential, das die Streuung des Nukleons v an dem Target A beschreibt, genähert werden kann:

$$V_{vA} = \frac{Z_A Z_v e^2}{r_{vA}} + U_{vA}^{opt}(r_{vA})$$

mit

Z_A , Z_v	Ladung von A und v
r_{vA}	Abstand zwischen v und A
U_{vA}^{opt}	Optisches Potential der Streuung von v an A

Das Valenzmatrixelement wird damit zu:

$$M_{\beta\alpha}(r) := \langle \phi_c^{\beta} | V_{vA} | \phi_c^{\alpha} \rangle =$$

$$= \sum_{qq'} a_{cq'}^{\beta *}\, a_{cq}^{\alpha} \int d r_{vc}\, \phi_{q'}^{*}(r_{vc})\, V_{vA}(|r + r_{vc}|)\, \phi_q(r_{vc})$$

Dabei wurde die Näherung $r_{cA} \approx r_{aA} \equiv r$ gemacht.

4. Moleküleffekte im System $^{13}C+^{12}C$

In diesem Kapitel, das eine Zusammenfassung gemeinsamer Arbeiten der Erlanger Schwerionengruppe mit W. Von Oertzen (HMI Berlin) und B. Imanishi (University of Tokyo) darstellt (16,17), wird untersucht, inwieweit molekulare Effekte bei dem System $^{13}C+^{12}C$ vorliegen.

Es liegt nahe nach Effekten zu suchen, die aus der "atomaren" Molekülphysik bekannt sind. Deshalb wurden folgende Fragestellungen untersucht:

(i) Kommt es zur Ausbildung bindender Molekülzustände, die durch eine hohe Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Valenznukleons zwischen den cores gekennzeichnet sind?

(ii)Gibt es aufgrund der verschiedenen Paritäten der p1/2, s1/2, und d5/2 Zustände in ^{13}C bei $E^* = 0.$, 3.088 und 3.854 MeV Hybridisierungseffekte, wie sie von Kohlenstoffverbindungen der organischen Chemie bekannt sind?

(iii) Existiert in der $^{13}C+^{12}C$-Streuung ein Analogon zum Landau-Zener-Effekt?

4.1 Bindende Molekülorbitale und Hybridisierung

Um die Frage klären zu können, ob es im System $^{13}C+^{12}C$ zur Bildung kovalenter Kernmoleküle kommt, wurden Gekoppelte-Kanäle-Rechnungen im Rahmen des in Kap. 3.1 beschriebenen Formalismus durchgeführt.

Dabei wurden die Zustände $^{13}C(1/2^-,gs)+^{12}C(gs)$, $^{13}C(1/2^+,3.088$ MeV) und $^{13}C(5/2^+,3.854$ MeV) gekoppelt. Alle ^{13}C-Zustände sind gute

Tab. 4.1: Spektroskopische Faktoren für das System $^{13}C+^{12}C$

Konfiguration	S (verwendet)	S (Literatur)
$^{13}C(1/2^-) = {}^{12}C+(p1/2)$	0.72	0.72 (26), 0.66 (27)
$^{13}C(1/2^+) = {}^{12}C+(s1/2)$	0.36	0.36 (29)
$^{13}C(5/2^+) = {}^{12}C+(d5/2)$	0.81	0.57 (26), 0.8 (30)
		1.1 (31)

Tab. 4.2: Optische-Modell-Parameter für die CRC-Rechnungen für das $^{13}C+^{12}C$-System

Realteil:

Kanal	V_0 (MeV)	c_r	r_r (fm)	a_r (fm)
elastisch	9.5	0.55	1.4	0.25
$1/2^+$	9.5	0.55	1.5	0.27
$5/2^+$	9.5	0.55	1.5	0.27

Imaginärteil:

Kanal	W_0 (MeV) Satz I	Satz II	c_i	r_i (fm)	a_i (fm)	E_{cm} (MeV)
elastisch	2.0	3.0				7.80
	2.0	3.0	0.1	1.35	0.30	8.84
	2.0	4.0				9.88
$1/2^+$	2.0	2.0				7.80
	2.0	3.0	0.1	1.35	0.30	8.84
	2.0	4.0				9.88
$5/2^+$	0.0	0.1				7.80
	0.1	1.0	0.05	1.35	0.30	8.84
	0.5	2.0				9.88

Die Potentiale sind energieabhängig:

$$V = V_0 + c_r E_{ch}$$
$$W = W_0 + c_i E_{ch} \qquad E_{ch} = E_{cm} + Q \text{ (Kanalenergie)}$$

Einteilchenzustände. Die verwendeten spektroskopischen Faktoren sind S = 0.72 ($1/2^-$), S = 0.36 ($1/2^+$) und S = 0.81 ($5/2^+$). In Tabelle 4.1 werden diese Werte mit den Literaturwerten verglichen. Der Vergleich ergibt, daß die verwendeten spektroskopischen Faktoren gut mit den veröffentlichten Werten übereinstimmen.

Die Bindungsenergie des Valenzneutrons in ^{13}C beträgt 4.95 MeV (gs), 1.86 Mev ($1/2^+$) und 1.09 MeV ($5/2^+$).

Die Molekülwellenfunktionen wurden bei diesen Rechnungen gemäß (3.1.25) aus Einteilchenwellenfunktionen des ^{13}C-Valenznukleons zusammengesetzt. Diese wurden für ein Potential berechnet, das in der Lage ist für alle drei ^{13}C-Zustände die Bindungsenergie zu reproduzieren.

Die Figuren 20 bis 22 zeigen die experimentellen Daten für die elastische und die inelastische Streuung zu dem $s1/2^+$ bzw. $d5/2^+$ Zustand in ^{13}C für die Energien E_{cm} = 7.80, 8.84 und 9.88 MeV. Die durchgezogenen Linien in den Figuren sind die mit Hilfe des CRC-Formalismus berechneten Wirkungsquerschnitte. Die Rechnungen wurden mit zwei Parametersätzen durchgeführt (gestrichelte bzw. durchgezogene Kurve), die sich nur im Imaginärpotential leicht unterscheiden (Tab.4.2). Die Potentiale sind energieabhängig:

$$V_r = V_o + c_r E_{ch}$$
$$V_i = W_o + c_i E_{ch} \qquad (4.1.1)$$

mit V_r, V_i Tiefe des reellen, imaginären Potentials

E_{ch} Kanalenergie: $E_{ch} = E_{cm} - Q$

Die Übereinstimmung der Rechnungen mit den Daten ist sehr gut. Bei den CRC-Rechnungen (siehe 3.1) werden Molekülorbitale als Basisfunktionen verwendet, die wie bei der LCNO aus asymptotischen Einteilchenzuständen zusammengesetzt werden. Die gute Übereinstimmung der Rechnung mit den Daten ist daher ein Nachweis für Molekülbildung im System $^{13}C+^{12}C$.

Wie in Kap. 3.1 erwähnt, sind die direkten Wechselwirkungen für Hybridisierungseffekte von entscheidender Bedeutung. Die unter-

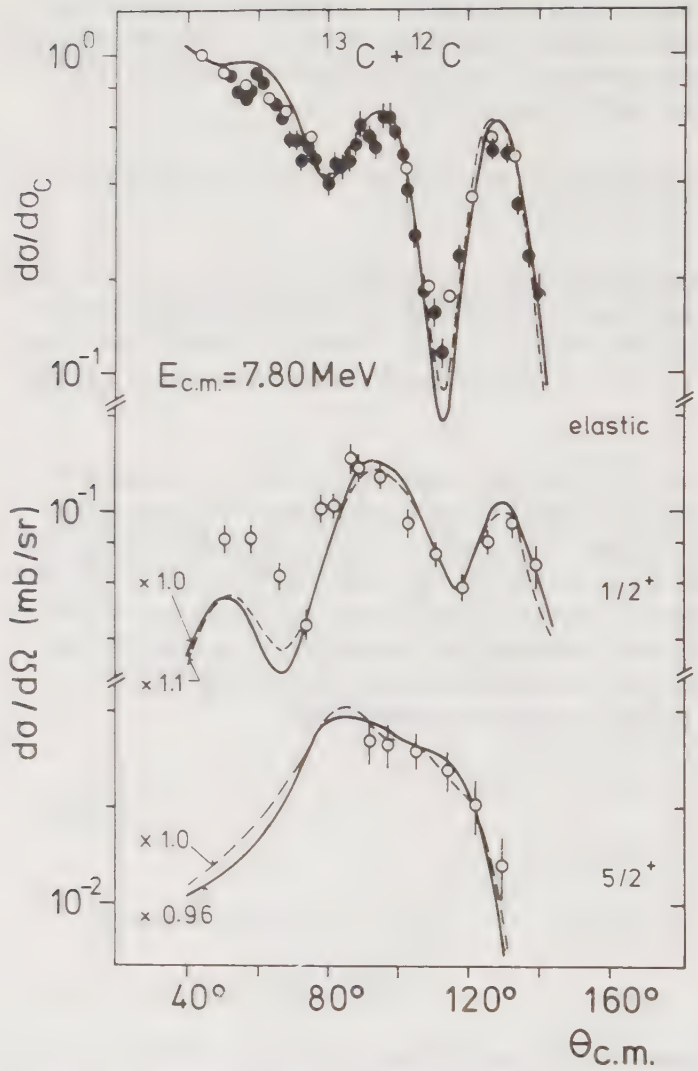


Fig. 20: Experimentelle und theoretische (CRC-Rechnungen) Winkelverteilungen der elastischen und inelastischen Streuung von $^{13}C+^{12}C$ für E_{cm} = 7.80 MeV. Die durchgezogenen Linien stellen Rechnungen dar, die mit Parametersatz I durchgeführt wurden. Die gestrichelten Kurven wurden mit Satz II berechnet. Die Zahlen an den Kurven sind Normierungsfaktoren, mit denen die Ergebnisse der Rechnungen multipliziert wurden.

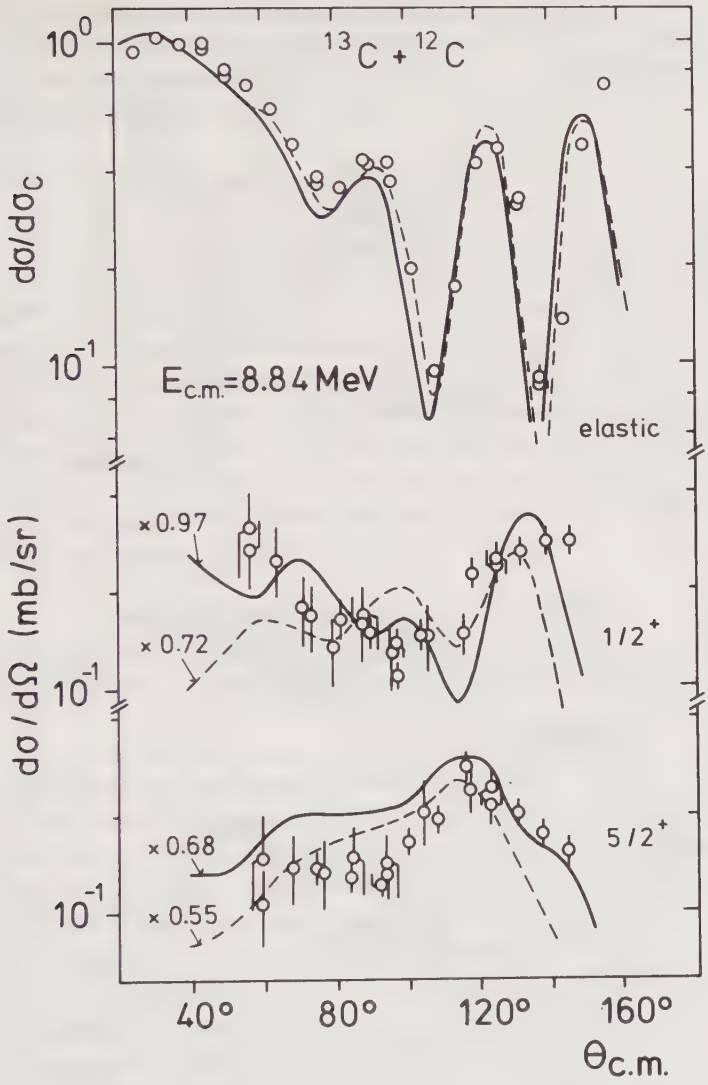


Fig. 21: Experimentelle und theoretische (CRC-Rechnungen) Winkelverteilungen der elastischen und inelastischen Streuung von $^{13}C+^{12}C$ für E_{cm} = 8.84 MeV. Die durchgezogenen Linien stellen Rechnungen dar, die mit Parametersatz I durchgeführt wurden. Die gestrichelten Kurven wurden mit Satz II berechnet. Die Zahlen an den Kurven sind Normierungsfaktoren, mit denen die Ergebnisse der Rechnungen multipliziert wurden.

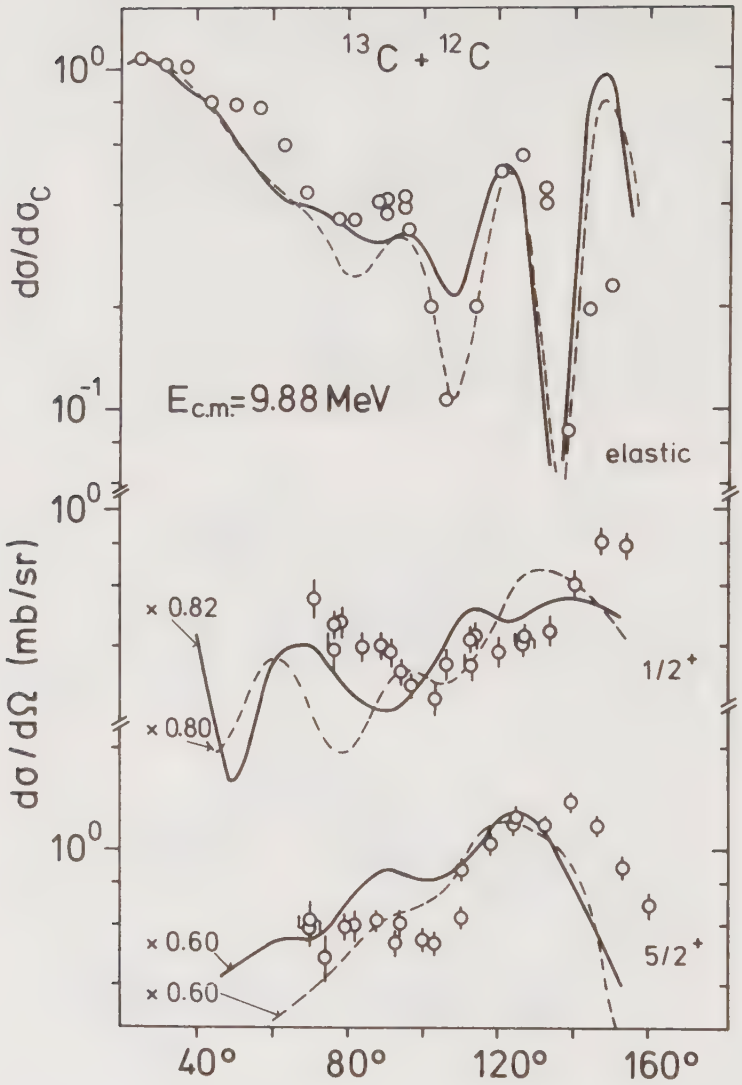


Fig. 22: Experimentelle und theoretische (CRC-Rechnungen) Winkelverteilungen der elastischen und inelastischen Streuung von $^{13}C+^{12}C$ für E_{cm} = 9.88 MeV. Die durchgezogenen Linien stellen Rechnungen dar, die mit Parametersatz I durchgeführt wurden. Die gestrichelten Kurven wurden mit Satz II berechnet. Die Zahlen an den Kurven sind Normierungsfaktoren, mit denen die Ergebnisse der Rechnungen multipliziert wurden.

schiedlichen Paritäten der p- und sd-Zustände in ^{13}C lassen eine starke Hybridisierung erwarten. Die damit verbundene starke Polarisierung der Einteilchenorbitale sollte zu einer Vergrößerung der inelastischen Wirkungsquerschnitte führen.

Dies läßt sich in der Tat beobachten:

Fig.24 zeigt die berechneten Wirkungsquerschnitte für den Kanal $^{12}C(^{13}C,^{13}C(1/2^+))^{12}C$. Die durchgezogenen Kurven sind das Ergebnis einer voll gekoppelten Rechnung, die gestrichelten Kurven stellen Ergebnisse von Rechnungen dar, die man unter Ausschluß der direkten Wechselwirkung erhält. Es wird deutlich, daß die Transferwechselwirkungen zwar ausreichen um die Form der Winkelverteilung in etwa zu reproduzieren, die richtige Höhe des Wirkungsquerschnitts erhält man jedoch nur, wenn man die direkten Prozesse einschließt. Fig.25 zeigt, daß auch beim elastischen Kanal sowohl die direkten als auch die Transferwechselwirkungen wichtig sind.

Es handelt sich hier nicht um einen einfachen additiven Effekt, sondern um eine Vergrößerung des Wirkungsquerschnitts durch Polarisierung der ^{13}C-Orbitale als Folge der p-sd-Hybridisierung.

Aus der atomaren Molekülphysik ist bekannt, daß <u>bindende Zustände</u> durch eine hohe Aufenthaltswahrscheinlichkeit der Elektronen zwischen den Kernen gekennzeichnet sind. Fig.26 zeigt Dichteverteilungen des Valenzneutrons im System $^{13}C+^{12}C$, die im RMO-Modell (siehe Kap. 3.2) für die grazing-Partialwelle für verschiedene Abstände berechnet wurden (siehe Bild). Es sind jeweils die Zustände p = 1 und 2 (k = 1/2) für positive und negative Gesamtparität dargestellt. Man kann diesen Plots entnehmen, daß bei den Zuständen positiver Gesamtparität Π = + die Neutronendichte zwischen den Kernen deutlich erhöht ist. Die Zustände positiver Gesamtparität sind deswegen die Kandidaten für die bindenden Orbitale. Bindende Zustände können daher durch einen hohen Anteil der Π = + Zustände am Gesamtwirkungsquerschnitt nachgewiesen werden.

Die Figuren 27 bis 28 zeigen deutlich, daß es beim System $^{13}C+^{12}C$ <u>kovalente Bindungen</u> gibt:

In Fig. 27a und 27b bedeutet die durchgezogene Linie jeweils den Wirkungsquerschnitt, der mit der vollen Wechselwirkung berechnet

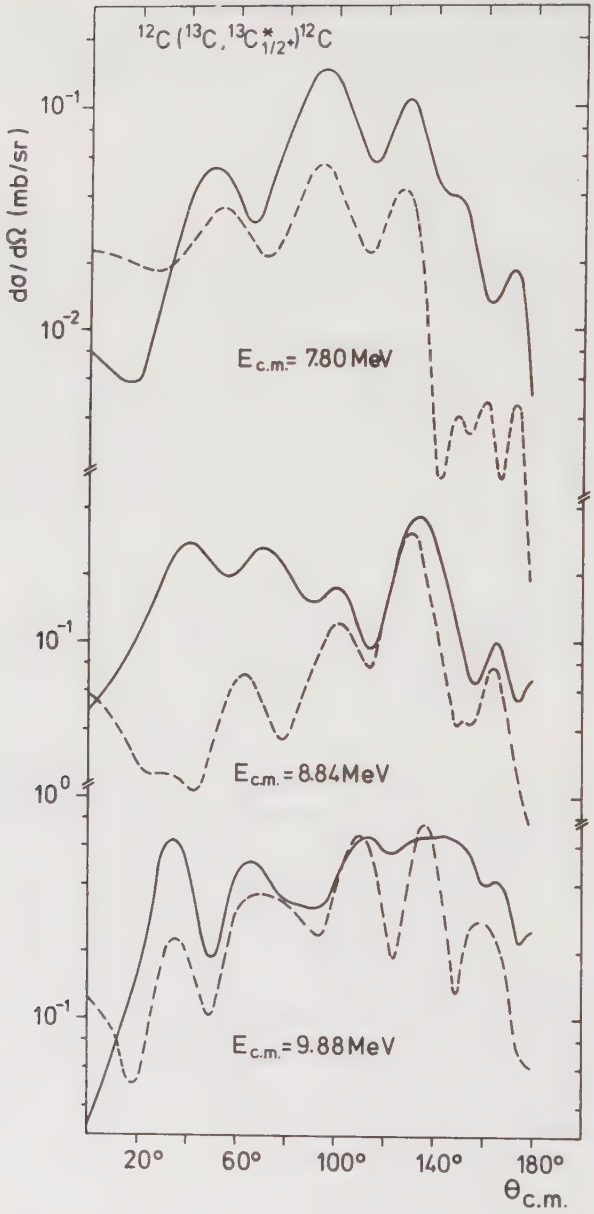


Fig. 24: Ergebnisse von CRC-Rechnungen (Satz I) für den $^{13}C(1/2^+)+$ ^{12}C-Kanal. Die durchgezogenen Linien erhält man bei voller Kopplung, die gestrichelten Linien sind das Ergebnis von Rechnungen unter Ausschluß der direkten Prozesse (DI).

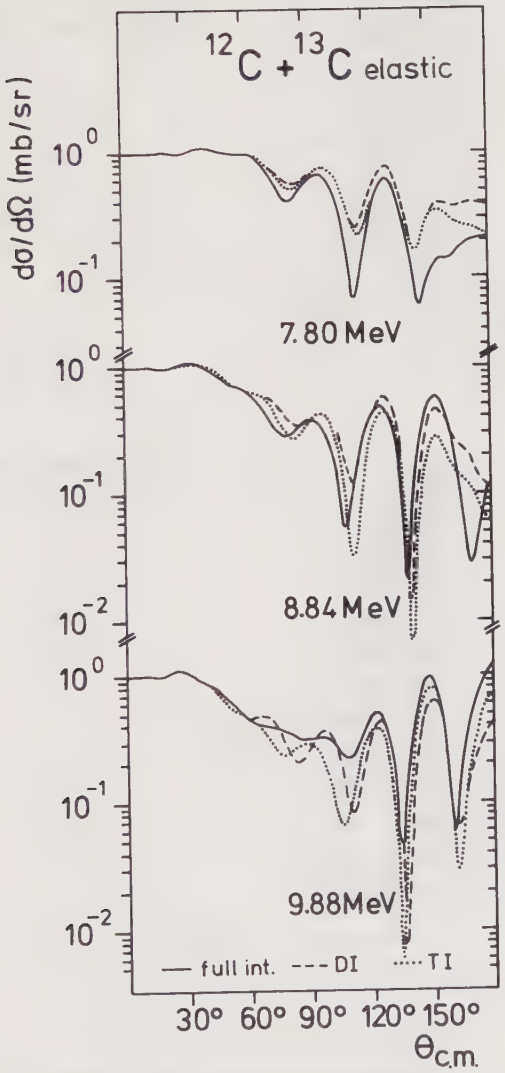


Fig. 25: CRC-Rechnungen für die elastische Streuung $^{13}C+^{12}C$ (Satz I). Die durchgezogenen Linien stellen voll gekoppelte Rechnungen dar. Die gestrichelten Kurven sind Beiträge der direkten Prozesse (DI). Die gepunkteten Kurven sind Beiträge der Transferprozesse (TI).

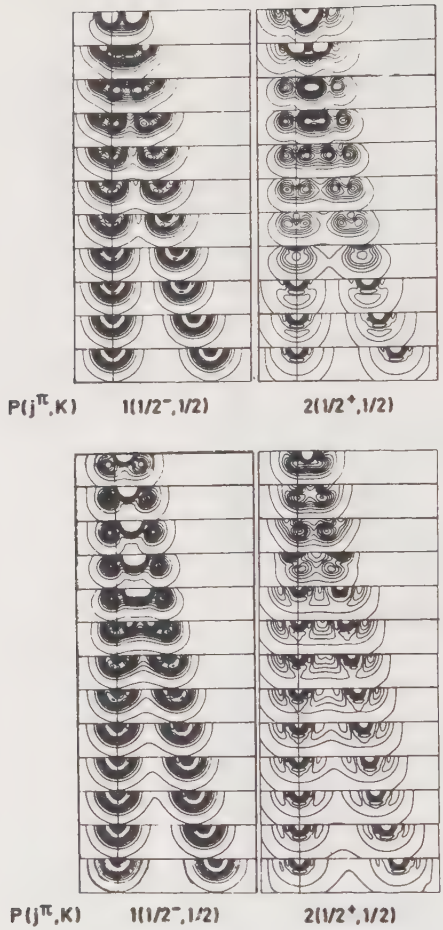


Fig. 26: Dichteverteilung des Valenzneutrons beim $^{13}C+^{12}C$-System für verschiedene core-core-Abstände. Die Verteilungen wurden im RMO-Modell berechnet. Bei den Zuständen positiver Gesamtparität Π = + erfolgt bei kleinen Abständen eine Neutronkonzentration zwischen den cores.

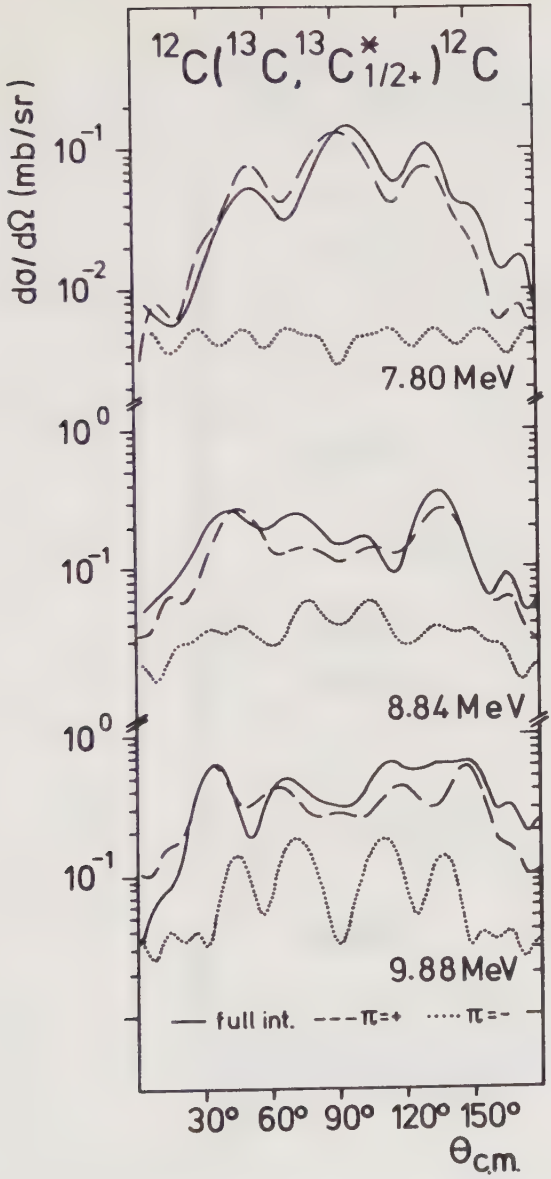


Fig. 27a: CRC-Rechnungen für die inelastische Streuung $^{12}C(^{13}C,^{13}C(1/2^{+}))^{12}C$ (Satz I). Die durchgezogenen Linien sind das Ergebnis voll gekoppelter Rechnungen. Die gestrichelten bzw. gepunkteten Linien stellen die Beiträge der $\pi = +$, bzw. $\pi = -$ Zustände dar.

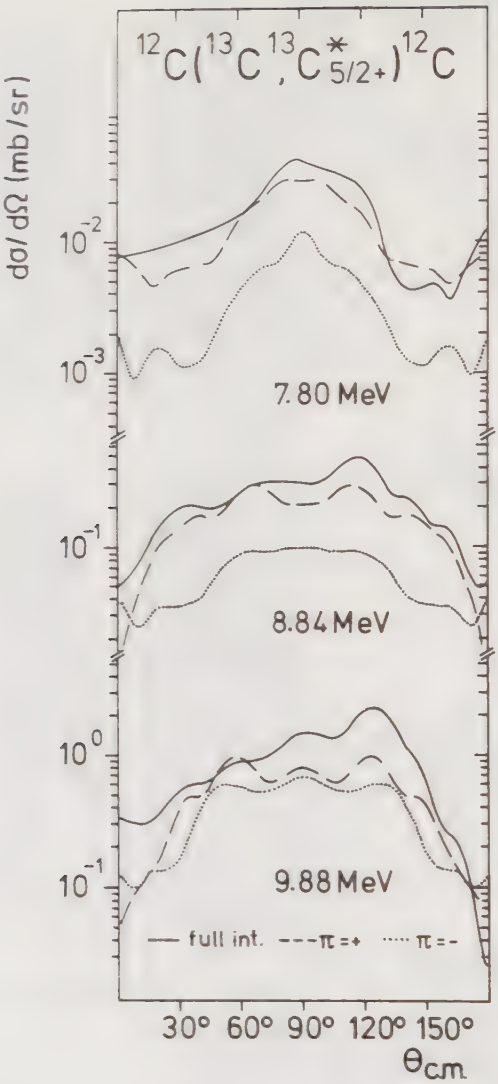


Fig. 27b: CRC-Rechnungen für die inelastische Streuung $^{12}C(^{13}C,^{13}C(5/2^{+}))^{12}C$ (Satz I). Die durchgezogenen Linien sind das Ergebnis voll gekoppelter Rechnungen. Die gestrichelten bzw. gepunkteten Linien stellen die Beiträge der $\overline{\Pi}$ = +, bzw. $\overline{\Pi}$ = - Zustände dar.

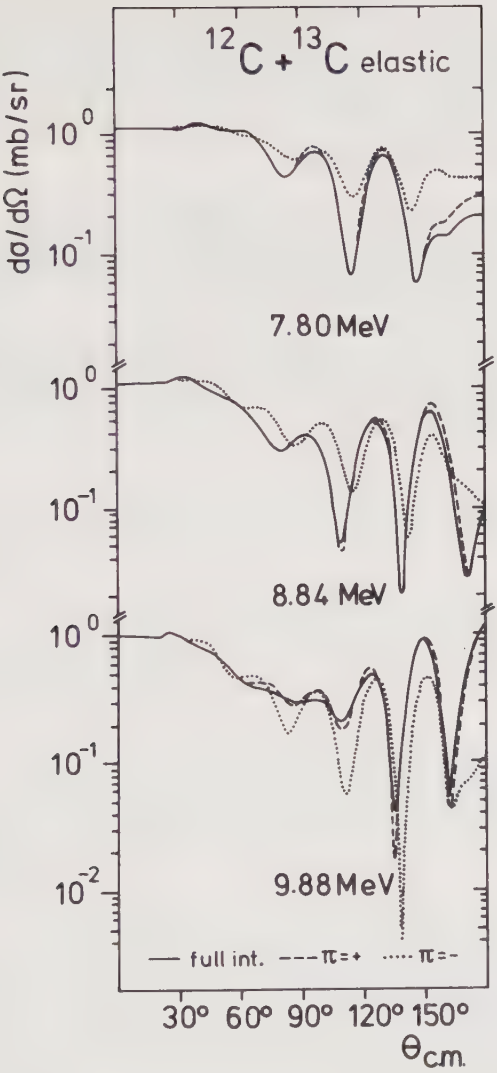


Fig. 28: CRC-Rechnungen für die elastische Streuung $^{12}C(^{13}C, ^{13}C)^{12}C$ (Satz I). Die durchgezogenen Linien sind das Ergebnis voll gekoppelter Rechnungen. Die gestrichelten bzw. gepunkteten Linien stellen die Beiträge der π = +, bzw. π = - Zustände dar.

wurde. Die gestrichelte Linie gibt den Wirkungsquerschnitt an, den man erhält, wenn man bei der Rechnung nur Zustände mit positiver Gesamtparität Π = + berücksichtigt. Die gepunktete Linie erhält man für Π = - Zustände. Bei der niedrigsten Energie wird der Wirkungsquerschnitt fast ausschließlich durch die Π = + Zustände bestimmt. Mit zunehmender Energie wird der Π = - Beitrag so groß, daß er den Gesamtquerschnitt merklich beeinflusst.

Der vernachlässigbar kleine Anteil der Π = - Zustände bei 7.80 MeV zeigt, daß in diesem Energiebereich Π = + Zustände dominieren, d.h. bindende Molekülorbitale existieren.

Die Form der elastischen Streuung wird bei allen Energien von den Π = + Zuständen bestimmt (Fig.28). Auch dies ist ein Hinweis auf die Bildung eines kovalenten Moleküls.

4.2 Nukleare Landau-Zener-Übergänge

Der Landau-Zener-Effekt ist aus der Atom-Atom-Streuung bekannt. In sogenannten Korrelationsdiagrammen trägt man die Energien der Molekülorbitale als Funktion des Abstandes auf. Dabei treten neben "crossings" zwischen Zuständen verschiedener k-Quantenzahl (k ist der Drehimpuls bezüglich der Molekülachse) auch sogenannte "pseudo crossings" oder "avoided crossings" zwischen Zuständen gleicher k-Quantenzahl auf (Fig.29).

Landau und Zener haben nachgewiesen, daß bei solchen avoided crossings Übergänge zwischen den beiden Molekülzuständen stattfinden können.

Fig.30 zeigt die Winkelverteilungen des $^{13}C(1/2^+)+^{12}C$ Ausgangskanals. Auffällig ist die plötzliche Formänderung zwischen E_{cm} = 7.80 MeV und E_{cm} = 8.30 MeV.

Diese Änderung erfolgt zu abrupt um durch Effekte des effektiven Streupotentials erklärt werden zu können. Das wird auch durch den relativ glatten Verlauf der elastischen Streuung über der Energie bestätigt (Fig.31).

Um den Einfluß etwaiger statistischer Fluktuationen abschätzen zu können, wurden Hauser-Feshbach-Rechnungen durchgeführt. Dazu wurde der Code HAUS von W. Treu verwendet. Das Programm liest die benötigten Größen der Restkernzustände von einer in Erlangen angelegten Datenbank ein, die alle gegenwärtig erhältlichen Kernzustände enthält. Auf die Verwendung der Niveaudichteformel konnte daher weitgehend verzichtet werden. Die verwendeten Optische-Modell- und Niveaudichte-Parameter stammen aus Ref.40. Die Parameter für Ausgangskanäle, die in Ref.40 nicht enthalten sind, wurden Ref.41 bzw. Ref.35 entnommen. Die berechneten Wirkungsquerschnitte lagen um drei bis vier Größenordnungen unter den Daten. Statistische Fluktuationen können daher die Formänderung im $^{13}C(1/2^+)+^{12}C$-Ausgangskanal nicht

erklären.

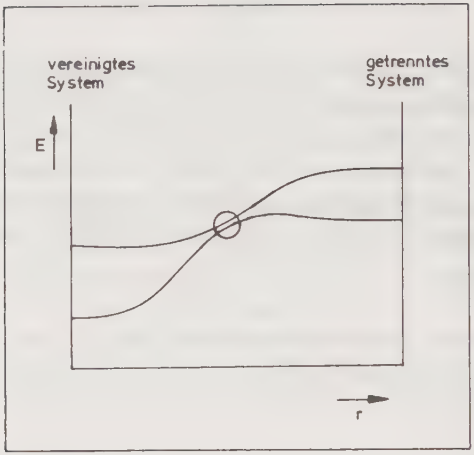


Fig. 29: Der Landau-Zener-Effekt (schematisch).

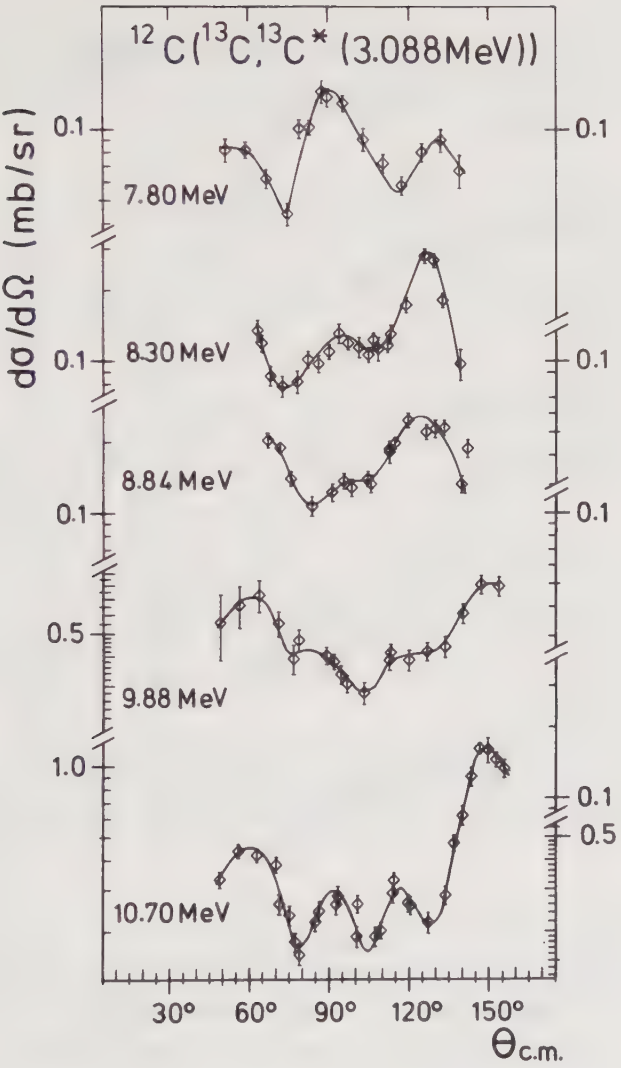


Fig. 30: Winkelverteilungen der inelastischen Streuung
$^{12}C(^{13}C,^{13}C(1/2^+))^{12}C$.
Die durchgezogenen Linien sind Sichthilfen. Deutlich erkennt man eine Formänderung zwischen 7.8 und 8.3 MeV.

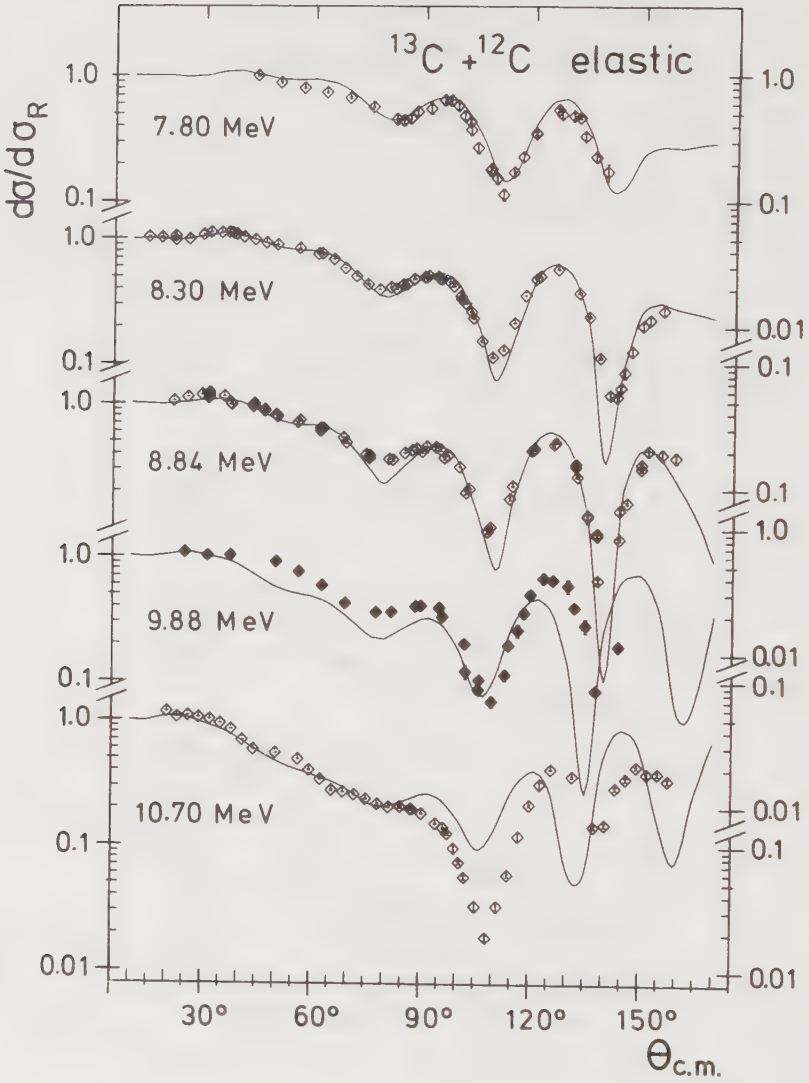


Fig. 31: Winkelverteilungen der elastischen Streuung $^{13}C+^{12}C$.
Die durchgezogenen Linien sind Ergebnisse von CRC-Rechnungen.

Bei E_{cm} = 7.80 MeV bestimmen offensichtlich Zustände positiver Gesamtparität den Wirkungsquerschnitt. Dieser ist symmetrisch um 90° und weist bei 90° ein Maximum auf. Das rührt daher, daß wie in Kap. 3.1 bereits gezeigt, bei dieser Energie π = + Zustände, also Molekülzustände dominieren. Ab 8.30 MeV sind offenbar Zustände negativer Gesamtparität π = - mitbeteiligt. Die 90°-Symmetrie verschwindet.

Eine plausible Erklärung der plötzlichen Symmetrieänderung wäre die Existenz von avoided crossings im adiabatischen $^{13}C+^{12}C$-Potential und damit verbundenen nuklearen Landau-Zener-Übergängen bei kleinen Abständen zwischen den Molekülzuständen mit p=1 und p=2 und negativer Gesamtparität (Zustände mit p=1 und p=2 gehen asymptotisch in die Zustände $^{13}C(gs)+^{12}C(gs)$ und $^{13}C(1/2^+)+^{12}C(gs)$ über).

Wenn die avoided crossings bei kleinen Abständen $r_{cr} < r_b$ (r_b Barrierenradius) liegen, finden für Einschußenergien unterhalb der Barriere keine Landau-Zener-Übergänge statt, und der Wirkungsquerschnitt wird fast ausschließlich durch die Zustände mit π = + bestimmt. Wird nun die Barriere überschritten, kann der Abstand r_{cr} erreicht werden, vorausgesetzt die Absorption ist in diesem Bereich nicht zu stark. Dadurch erhält der $^{13}C(1/2^+)$-Zustand durch Landau-Zener-Übergänge (p=1 --> p=2) plötzlich Beimischungen negativer Gesamtparität π = -. Dies führt zur Zerstörung der 90°-Symmetrie.

Zur Erhärtung dieser These wurden sowohl RMO-Rechnungen als auch CRC-Rechnungen in kleinen Energieschritten für den experimentell untersuchten Energiebereich durchgeführt. Der Parametersatz ist ähnlich zu dem in Kap.4.1 verwendeten (Tab.4.4).

Die Figuren 31 und 32 zeigen die elastische Streuung und den $^{13}C(1/2^+)+^{12}C$-Kanal mit den Ergebnissen der CRC-Rechnungen. Die Übereinstimmung mit den Daten ist im Fall der elastischen Streuung gut. Bei der inelastischen Streuung ist die Rechnung in der Lage den allgemeinen Verlauf der Daten über der Energie wiederzugeben, wenn auch die abrupte Symmetrieänderung etwas verschmiert wird.

Im Rahmen des RMO-Modells (Kap.3.2) wurden adiabatische Potentiale $V_p^{J\pi}(r)$ und die Kopplungsstärken $\Delta V_{pq}^{J\pi}(r)$ berechnet. Fig.33 zeigt die adiabatischen Potentiale $V_p(r)$ und die radiale Kopplung $\Delta V_{pq}(r)$ für J^{π} = 7/2⁻. Dieses J entspricht der grazing Partialwelle.

Tab. 4.4: Optische-Modell-Parameter für die CRC-Rechnungen.
(Spektroskop. Faktoren siehe Tab.4.1)

Kanal	V (MeV)	a (fm)	r (fm)	W (MeV)	a (fm)	r (fm)	b
elast.	15.0	0.25	1.40	5.0	0.30	1.35	/
$1/2^+$	13.2	0.27	1.50	1.	0.30	1.35	1.92
$5/2^+$	12.6	0.27	1.50	1.	0.30	1.35	0.96

b ist durch $W = W_0 + b(E_{cm} - 8.84\ MeV)$ definiert. W ist die Tiefe des Imaginärteils der inelastischen Kanäle (b = 0 für $E_{cm} < 8.84$ MeV). Für E_{cm} = 7.8 und 8.3 MeV wurde V_0 = 13.2 und 14.0 MeV für alle drei Kanäle verwendet.

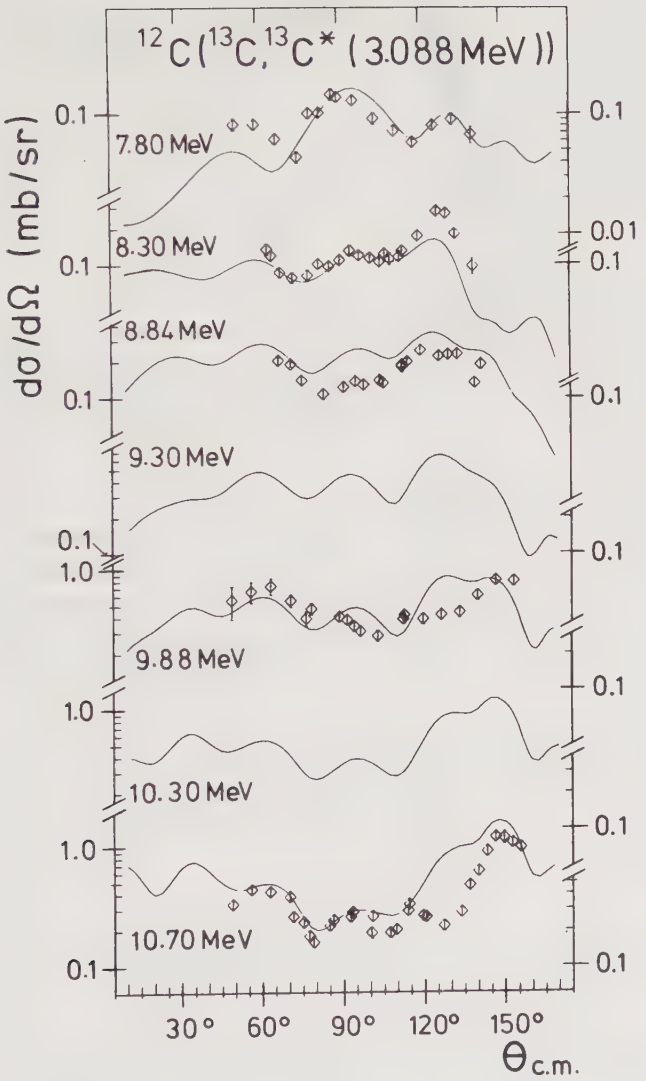


Fig. 32: CRC-Rechnungen für die inelastische Streuung $^{12}C(^{13}C,^{13}C(1/2^+))^{12}C$. Die offenen Rauten sind experimentelle Daten.

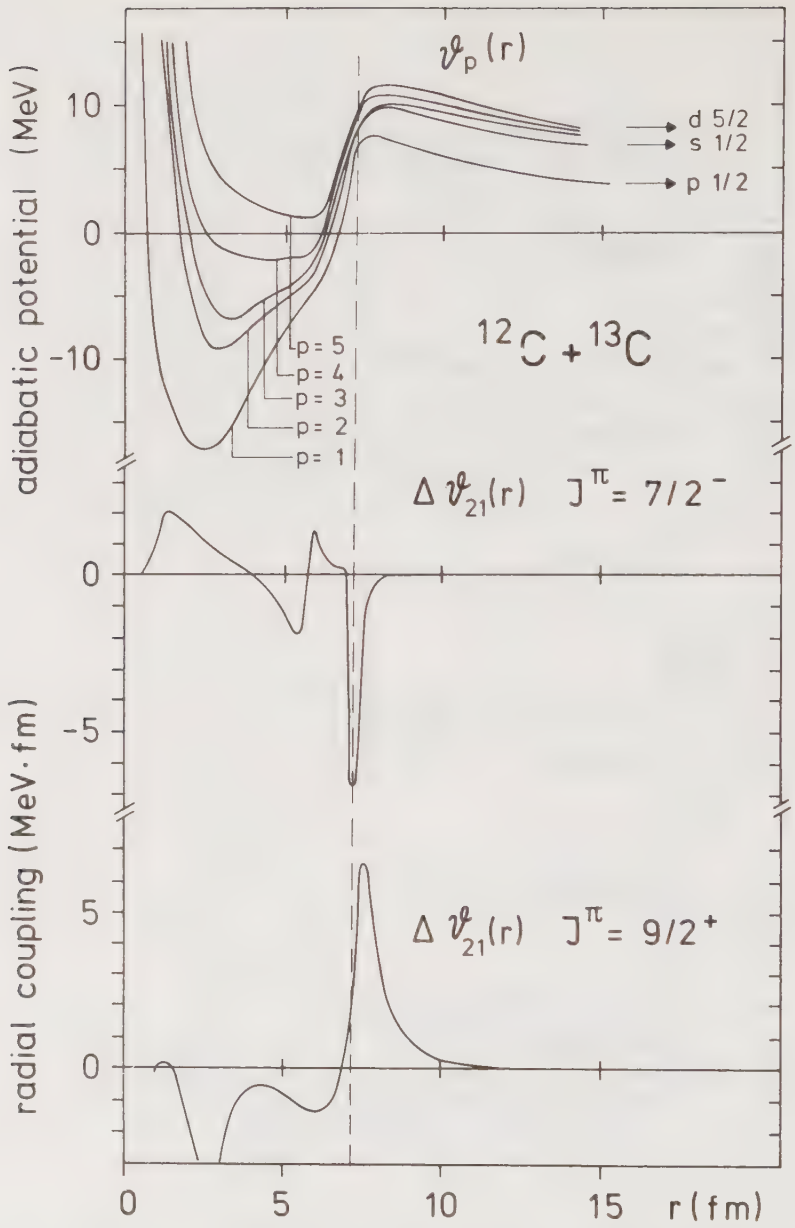


Fig. 33: Adiabatisches Potential $\vartheta_p(r)$ für durch p gekennzeichnete Molekülzustände (der p=1 Zustand geht asymptotisch in den $^{13}C(gs)+^{12}C$-Zustand, p=2 in $^{13}C(1/2^+)+^{12}C$ und p=3,4,5 in $^{13}C(5/2^+)+^{12}C$ über) und radiale Kopplungen $\Delta\vartheta_{21}(r)$ für $J^\pi = 7/2^-$ und $9/2^+$ (grazing l). Der scharfe Peak in $\Delta\vartheta_{21}(r)$ ($J^\pi = 7/2^-$) ist für Landau-Zener-Übergänge verantwortlich.

Offensichtlich gibt es zwischen V_1 und V_2 ein "avoided crossing" bei einem Abstand, der etwas kleiner als der Barrierenradius ist. Ein Blick auf die Kopplungsstärke ΔV_{21} zeigt, daß ΔV_{21} für $\Pi = -$ einen deutlichen Peak aufweist. Dieser Peak ist für die starken Landau-Zener-Übergänge verantwortlich. Auch für gerade Zustände $\Pi = +$ ist die radiale Kopplung gepeakt. Dies macht sich aber im Wirkungsquerschnitt nicht abrupt bemerkbar, weil die Kopplung sich bis zu großen r-Werten erstreckt und die geraden Zustände schon von vorneherein den überwiegenden Anteil am Wirkungsquerschnitt ausmachen.

Für höhere J-Werte wird der scharfe Landau-Zener-Peak in der Kopplung ΔV_{21} ($\Pi = -$) schwächer und breiter. Bei höheren Energien werden deshalb die Landau-Zener-Übergänge weniger wichtig, und die 90°-Symmetrie kehrt zurück. Die Winkelverteilung bei 10.7 MeV (Fig.29) scheint dies zu bestätigen.

In Ref.32 und 33 werden Resonanzstrukturen in den Anregungsfunktionen des Systems $^{13}C+^{12}C$ bei relativ hohen Energien als Landau-Zener-Übergänge interpretiert. Dagegen spricht die bei den vorliegenden Rechnungen gemachte Beobachtung, daß die Kopplungsstärke ΔV_{21} für höhere J-Werte (und damit für höhere Energien) eine sehr verschmierte Struktur aufweist (wenig gepeakt, sehr breit).

Das Verhalten der inelastischen Streuung beim System $^{13}C+^{12}C$ läßt sich also mit dem Nuklearen Landau-Zener-Effekt erklären.

5. Moleküleffekte im System $^{13}C+^{14}C$

Nachdem das Auftreten von molekularen Effekten (Hybridisierung, bindende Molekülorbitale, Landau-Zener-Effekt) beim Streusystem $^{13}C+^{12}C$ beobachtet wird, liegt es nahe auch in anderen Systemen nach diesen Effekten zu suchen. $^{13}C+^{14}C$ ist diesem System sehr ähnlich. ^{14}C hat eine abgeschlossene p1/2-Schale und sollte deswegen ein "guter" core (nur schwach an den Reaktionen beteiligt) sein. Die Messungen bestätigten dies jedoch nicht; besonders in der elastischen Streuung macht sich der Transfer der ^{14}C-Neutronen bemerkbar.

Leider gibt es bis jetzt für dieses System kein CRC-Programm, das Molekülwellenfunktionen als Basis verwendet. Auch ein Gekoppelte-Kanäle-Programm mit den üblichen Basisfunktionen und norecoil-Näherung (JUPITER IV H. Wolter) konnte nicht verwendet werden, weil die recoil-Effekte aufgrund langreichweitiger Einteilchenwellenfunktionen bei den angeregten ^{13}C- und ^{15}C-Zuständen (Bindungsenergien ca. 1MeV) nicht vernachlässigbar sind. Die Rechnungen wurde daher mit dem in 3.3 beschriebenen EFR-Code (JUPITER V von H. Wolter) durchgeführt (EFR: Exact Finite Range). In diesem Code wird das Streuproblem mit Hilfe einer Zwei-Stufen-DWBA berechnet. Es kann daher nicht erwartet werden, daß die Rechnung Moleküleffekte reproduziert. Allenfalls kann ein Versagen auf Mehrstufenprozesse (mehr als 2 Stufen) und Molekülbildung hinweisen.

Zunächst wurde durch Anfitten an die Daten der elastischen Streuung (Fig.34) ein Satz Optische-Modell-Parameter erzeugt (Tab. 5.1). Der Rückwärtsanstieg der Winkelverteilungen wurde dabei mit dem Einneutronentransfer $^{14}C(^{13}C,^{14}C)^{13}C$ berechnet und die resultierende Amplitude mit der OM-Amplitude kohärent addiert (OM: Optisches Modell). Obwohl in EFR gerechnet wurde, konnte nicht bei allen Energien eine gute Übereinstimmung mit den Daten bei gleichzeitiger monotoner Energieabhängigkeit der OM-Parameter erreicht werden. Vor allem im Interferenzbereich weicht die Rechnung von den Daten ab. Eine mögliche Erklärung dafür ist, daß der Transfer stark von Moleküleffekten beeinflußt wird. Derartige Vermutungen könnten allerdings

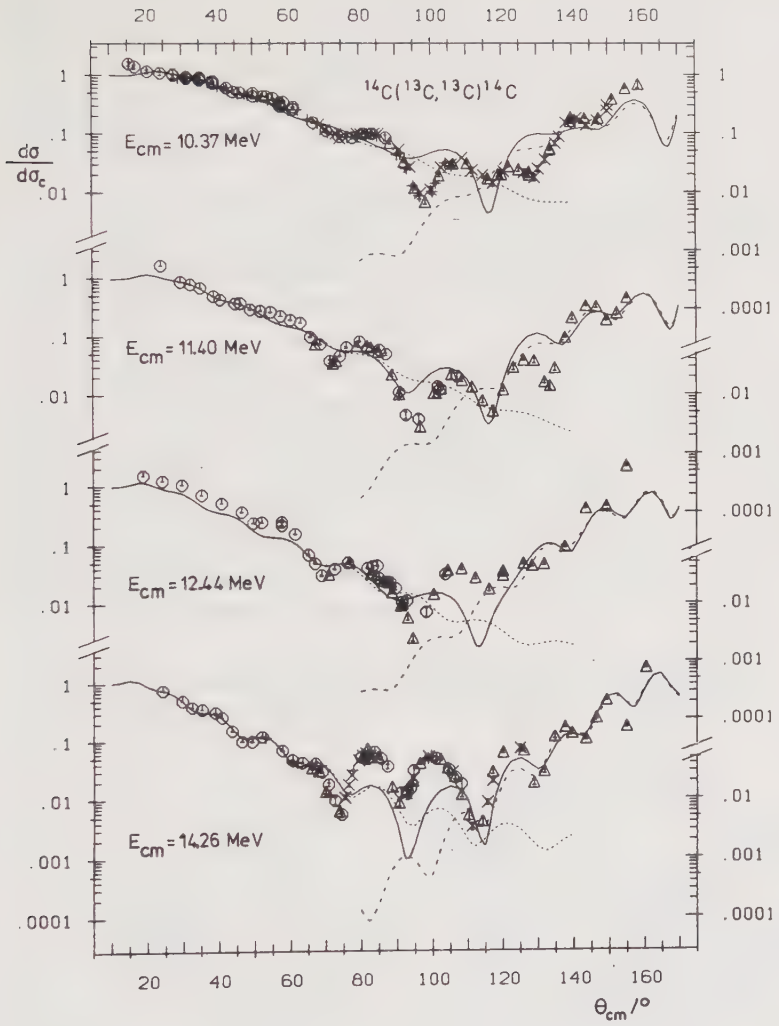


Fig.34: Winkelverteilungen der elastischen Streuung $^{13}C+^{14}C$. Die gepunktete Kurve ist das Resultat der OM - Rechnung. Die gestrichelte Linie gibt den elastischen Einneutronentransfer wieder. Die durchgezogene Linie erhält man durch kohärente Addition beider Amplituden.

Tab. 5.1: Optische Modell Parameter für das System $^{13}C+^{14}C$

E (MeV)	V (MeV)	r (fm)	a (fm)	W (MeV)	r (fm)	a (fm)
10.37				6.0		
11.40	17.	1.35	0.54	7.0	1.35	0.33
12.44				8.0		
14.26				10.0		

Tab. 5.2 Spektroskopische Amplituden $S^{1/2}$ für das $^{13}C+^{14}C$-System

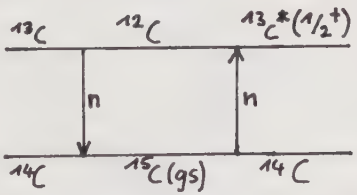
System	$S^{1/2}$ (verwendet)	$S^{1/2}$ (Literatur)	
$^{13}C(gs) = {}^{12}C+(p1/2)$	+0.78	+0.783 (37)	s.Tab.4.1
$^{13}C(1/2^+) = {}^{12}C+(s1/2)$	+0.6		s.Tab.4.1
$^{13}C(5/2^+) = {}^{12}C+(d5/2)$	+0.6		s.Tab.4.1
$^{14}C(gs) = {}^{13}C(gs)+(p1/2)$	-1.40	-1.359 (27)	
		-1.317 (37)	
$^{14}C(gs) = {}^{13}C(1/2^+)+(s1/2)$	+0.33	0.10 (38)	
$^{15}C(gs) = {}^{14}C(gs)+(s1/2)$	1.0	0.99 (39)	
$^{15}C(gs) = {}^{14}C(gs)+(d5/2)$	1.0	0.98 (39)	

nur durch CRC-Rechnungen mit Molekülbasisfunktionen bewiesen werden. Der so generierte Parametersatz (Tab.5.1) wurde zur Berechnung der inelastischen und Transfer-Querschnitte in allen Kanälen verwendet. Deshalb wurde bei der Parametersuche darauf Wert gelegt, daß das Potential die Vorwärtswinkel gut wiedergibt und eine glatte Energieabhängigkeit aufweist.

Bei den Rechnungen für die inelastischen bzw. Transferkanäle wurde jeweils für den Eingangs- und den Ausgangskanal der Parametersatz aus Tab. 5.1 verwendet. Die spektroskopischen Amplituden findet man zusammen mit Literaturwerten in Tab. 5.2.

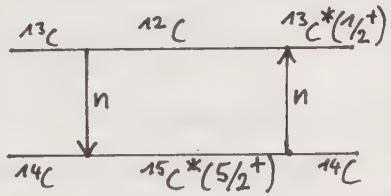
Fig.35 zeigt die experimentellen Daten der inelastischen Streuung $^{13}C(1/2^+)+^{14}C$ mit den für die einzelnen Übergänge berechneten Wirkungsquerschnitten. Die durchgezogenen Linien sind die kohärenten Summen der Vorwärts- bzw. Rückwärtsamplituden. Auffällig ist, daß die direkte Anregung (gestrichelt) bei Verwendung der spektroskopischen Amplituden aus der Literatur (Tab. 5.2) nicht ausreicht um die Absoluthöhe der Daten wiederzugeben. Erst die Berücksichtigung der beiden Zwei-Stufen-Transfers

$^{14}C(^{13}C,^{12}C)^{15}C(gs)(^{12}C,^{13}C(1/2^+))$



und

$^{14}C(^{13}C,^{12}C)^{15}C(5/2^+)(^{12}C,^{13}C(1/2^+))$



führt zur korrekten Höhe. Um die entsprechenden Rückwärtsamplituden zu berechnen, hätte man DWBA-Rechnungen dritter Stufe durchführen müssen. Dies führt zum einen dazu, daß Nichtorthogonalitätsterme eine nicht abschätzbare Rolle spielen, zum anderen war das Programm für derartige Rechnungen noch nicht voll ausgetestet. Der rückwärtige Teil der Winkelverteilung wurde daher, um Interferenzeffekte wiedergeben zu können, mit dem Einstufentransfer $^{14}C(^{13}C,^{14}C)^{13}C(1/2^+)$ und einem Anpassungsfaktor berechnet. Dabei wurde vorausgesetzt, daß

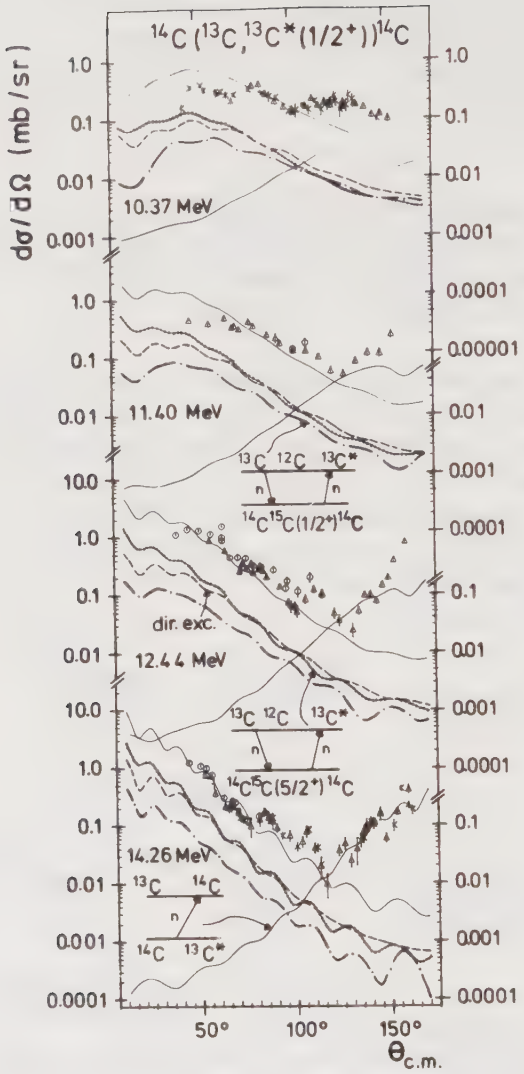


Fig.35: Winkelverteilungen der inelastischen Streuung $^{13}C+^{14}C$ zum $1/2^+$ Zustand in ^{13}C(3.088 MeV). Die gestrichelte Kurve stammt von der direkten inelastischen Anregung. Die strichpunktierte bzw. gepunktete Kurve gibt die Zweistufenneutronentransfers (siehe Bild) wieder. Die durchgezogene Kurve im Vorwärtswinkelbereich stellt die kohärente Summe dieser drei Beiträge dar, die durchgezogene Kurve im Rückwärtswinkelbereich den Wirkungsquerschnitt für den Einneutronentransfer $^{14}C(^{13}C,^{14}C)^{13}C(1/2^+)$

Phase und Form der Winkelverteilung in etwa vom Prozeß des Übergangs unabhängig sind. Fig.36 zeigt das Resultat der kohärenten Addition. Die Übereinstimmung mit dem Experiment ist bemerkenswert gut.

Der Ausgangskanal $^{12}C+^{15}C(5/2^+)$ (Fig.37) wird durch den Einneutronentransfer (Vorwärtswinkel) und durch den sequentiellen Zweineutronentransfer (Rückwärtsbereich) sehr gut beschrieben (spektroskopische Amplituden siehe Tab.5.2).

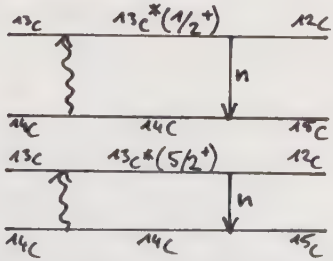
Die Wirkungsquerschnitte der Ausgangskanäle $^{13}C(1/2^+)+^{14}C$ und $^{12}C+^{15}C(5/2^+)$ lassen sich mit Ein- und Zwei-Stufen-Übergängen reproduzieren. Diese Reaktionskanäle liefern also keine Hinweise für molekulare Effekte.

Fig.38 zeigt den Ausgangskanal $^{12}C+^{15}C(gs)$. Die kurz gestrichelte Kurve stellt den für den Einneutronentransfer berechneten Wirkungsquerschnitt dar. Dieser reproduziert zwar die Absoluthöhe der Daten, gibt aber die Strukturen der Winkelverteilung nicht wieder. Das wird bei niedrigen Energien besonders deutlich. Bei der höchsten Energie (Fig.39) sind Daten und Rechnung nicht in Phase. Das rührt daher, daß die DWBA eine von der Realität abweichende Bevölkerung der magnetischen Unterzustände ergibt. Sehr wahrscheinlich ist der Grund dafür die Tatsache, daß sich während des Streuvorgangs molekulare Orbitale bilden und daß sich aufgrund der Corioliskopplung dadurch eine andere Besetzung von m-Zuständen als im DWBA-Bild ergibt. Dieser "out of phase"-Effekt tritt besonders deutlich bei reinen l=1-Transferübergängen zu Tage und wird allgemein als Evidenz für das Auftreten molekularer Effekte interpretiert (18,19,36).

Als weiter relevante Beiträge zur Vorwärtsamplitude wurden die Zwei-Stufen-Prozesse über die direkte inelastische Anregung im ^{13}C gefunden.

$^{14}C(^{13}C,^{13}C(1/2^+))^{14}C(^{13}C(1/2^+),^{12}C)^{15}C(gs)$

$^{14}C(^{13}C,^{13}C(5/2^+))^{14}C(^{13}C(5/2^+),^{12}C)^{15}C(gs)$



Der resultierende Gesamtwirkungsquerschnitt wird durch diese beiden Beiträge aber wenig geändert. Um auszuschließen, daß die starken

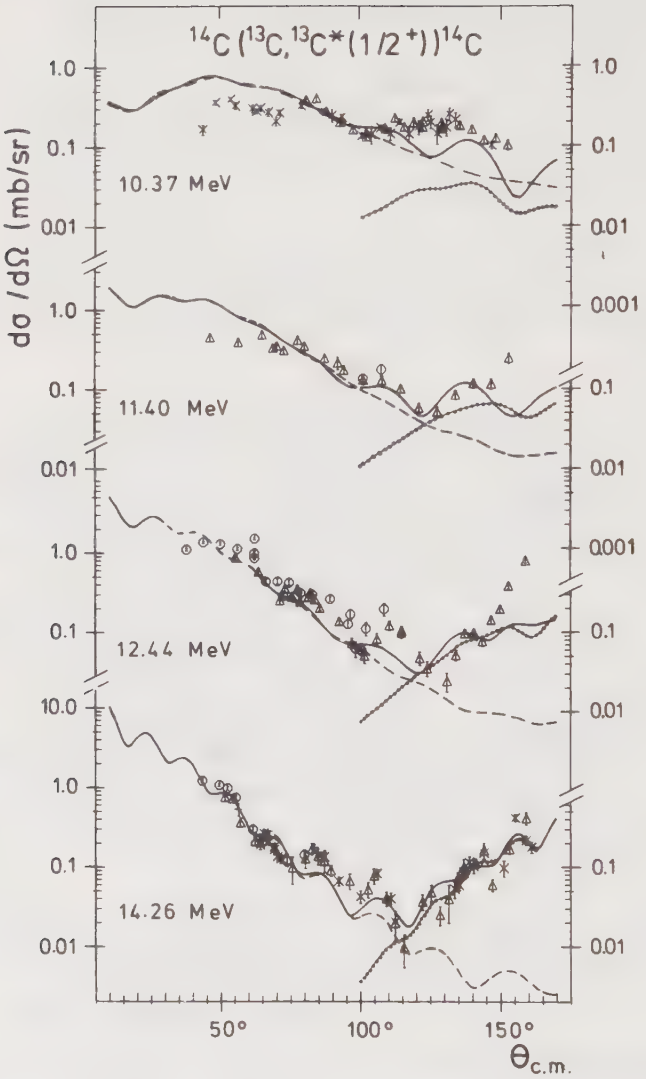


Fig.36: Winkelverteilung der inelastischen Streuung $^{13}C+^{14}C$ zum $1/2^+$ Zustand in $^{13}C(3.088\ MeV)$. Die durchgezogene Kurve stellt die kohärente Summe aller gerechneten Amplituden dar. Die gestrichelte Kurve steht für die Summe aller Amplituden im Vorwärtswinkelbereich (durchgezogene Kurve in Fig.35), die gepunktete Linie ist der berechnete Wirkungsquerschnitt für den Einneutronentransfer $^{14}C(^{13}C,^{14}C)^{13}C(1/2^+)$.

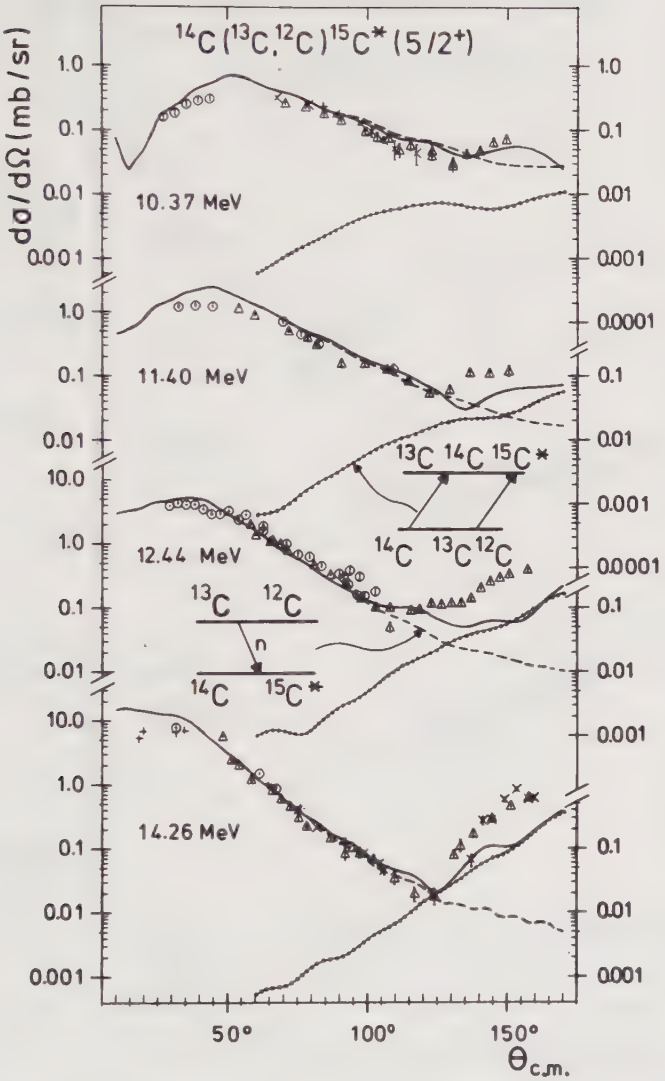


Fig.37: Winkelverteilungen der Reaktion $^{14}C(^{13}C,^{12}C)^{15}C(5/2^+)$. Die gestrichelte bzw. gepunktete Kurve stellt die berechneten Wirkungsquerschnitte für die in der Zeichnung angegebenen Übergänge dar. Die durchgezogene Linie ergibt sich als kohärente Summe der beiden obigen Beiträge.

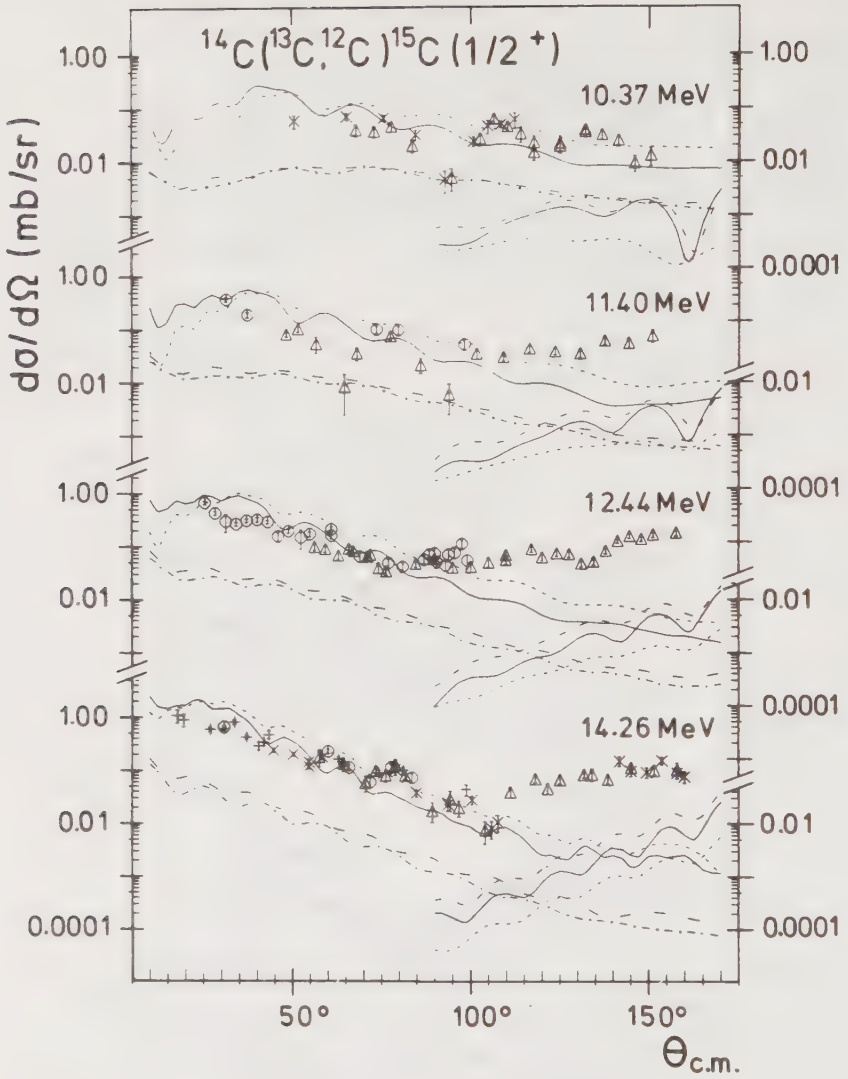


Fig.38: Winkelverteilungen der Reaktion $^{14}C(^{13}C,^{12}C)^{15}C(gs)$.

Vorwärtsamplituden:

Einneutronentransfer $^{14}C(^{13}C,^{12}C)^{15}C$ (gepunktet)

Einneutronentransfer nach vorhergehender inelastischer Anregung $^{14}C(^{13}C,^{13}C(1/2^+))^{14}C(^{13}C(5/2^+),^{12}C)^{15}C$ (strichpunktiert).

Summe (durchgezogen)

Rückwärtsamplituden:

$^{14}C(^{13}C,^{14}C)^{13}C(^{14}C,^{15}C)^{12}C$ (gestrichelt)

$^{14}C(^{13}C,^{14}C)^{13}C(1/2^+)(^{14}C,^{15}C)^{12}C$ (gepunktet)

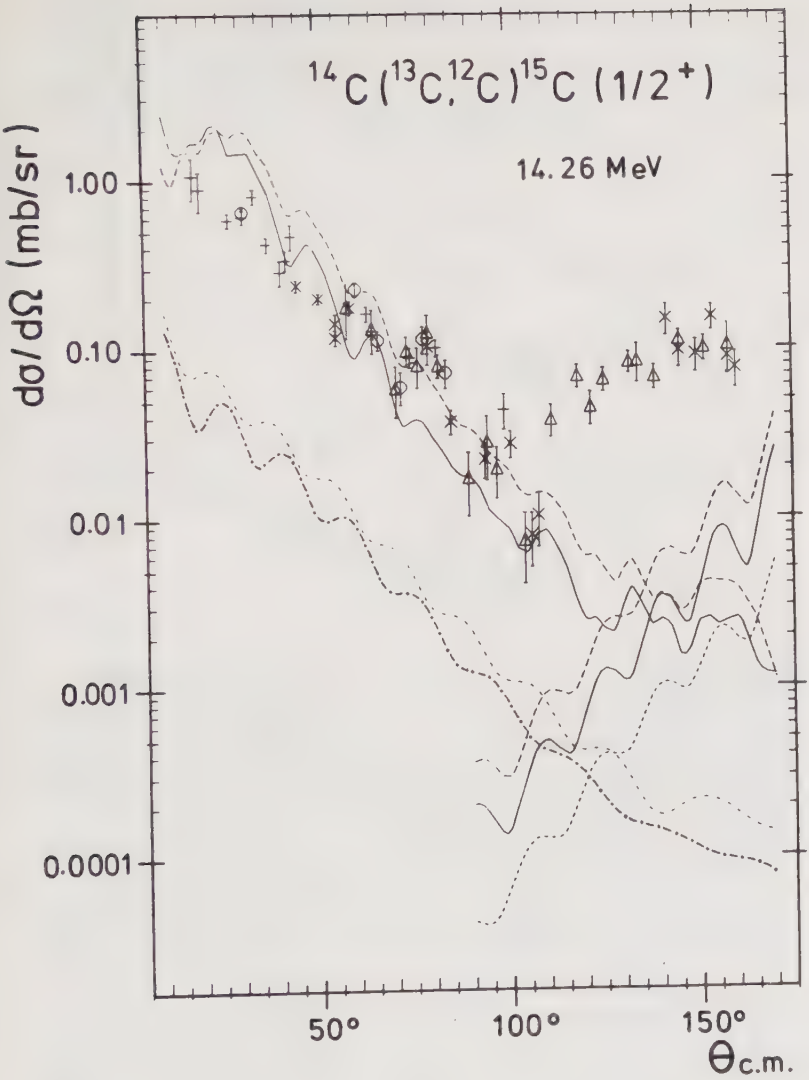
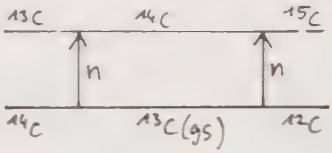


Fig.39: Winkelverteilung der Reaktion $^{14}C(^{13}C,^{12}C)^{15}C(gs)$
Bedeutung der Kurven wie in Fig.38

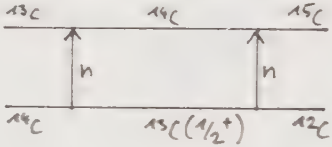
Minima in den gemessenen Winkelverteilungen des Kanals $^{12}C+^{15}C(gs)$ bei 10.37 und 11.40 MeV durch Interferenzeffekte zwischen Vorwärts- und Rückwärtsamplituden verursacht werden, wurde auch die Rückwärtsamplitude berechnet und kohärent addiert. Als relevante Rückwärtsamplituden ergaben sich die der beiden sequentiellen Neutronentransfers

$^{14}C(^{13}C,^{14}C)^{13}C(gs)(^{14}C,^{15}C)^{12}C$ (gestrichelt in Fig.38)



und

$^{14}C(^{13}C,^{14}C)^{13}C(1/2^+)(^{14}C,^{15}C)^{12}C$ (gepunktet in Fig.38).



berechnet.

Die kohärente Summe beider Amplituden ist in Fig.38 durchgezogen. Fig.40 zeigt die kohärente Summe der Vorwärts und Rückwärtsamplituden, wobei die Rückwärtsamplitude mit einem Anpassungsfaktor versehen wurde um die Absoluthöhe des Rückwärtsanstiegs zu reproduzieren (dies ist sinnvoll, weil andere wichtige Übergänge, wie z.B. der simultane Zwei-Neutronen-Transfer, nicht berechnet werden konnten). Obwohl die Phase bei der kohärenten Addition variiert wurde, gelang es nicht, die Minima bei den Energien 10.37 und 11.40 MeV zu reproduzieren. Interferenzeffekte können diese Minima also nicht verursachen.

Fig.41 zeigt den Ausgangskanal $^{12}C+^{15}C(gs)$ in einer Darstellung, die erkennen läßt, daß sich die Form der Winkelverteilung zwischen 11.40 und 12.44 MeV plötzlich ändert. Beim System $^{13}C+^{12}C$ wurde eine ähnlich rasche Änderung beobachtet, die durch Landau-Zener-Übergänge verursacht wird. Dies läßt vermuten, daß Landau-Zener-Übergänge auch beim System $^{13}C+^{14}C$ eine Rolle spielen.

Die Winkelverteilungen des Systems $^{13}C+^{14}C$ sind für alle Ausgangskanäle mit Ein- und Zwei-Stufen-Rechnungen reproduzierbar. Eine Ausnahme bildet der Kanal $^{12}C+^{15}C(gs)$. Die vollkommen unbefriedigende

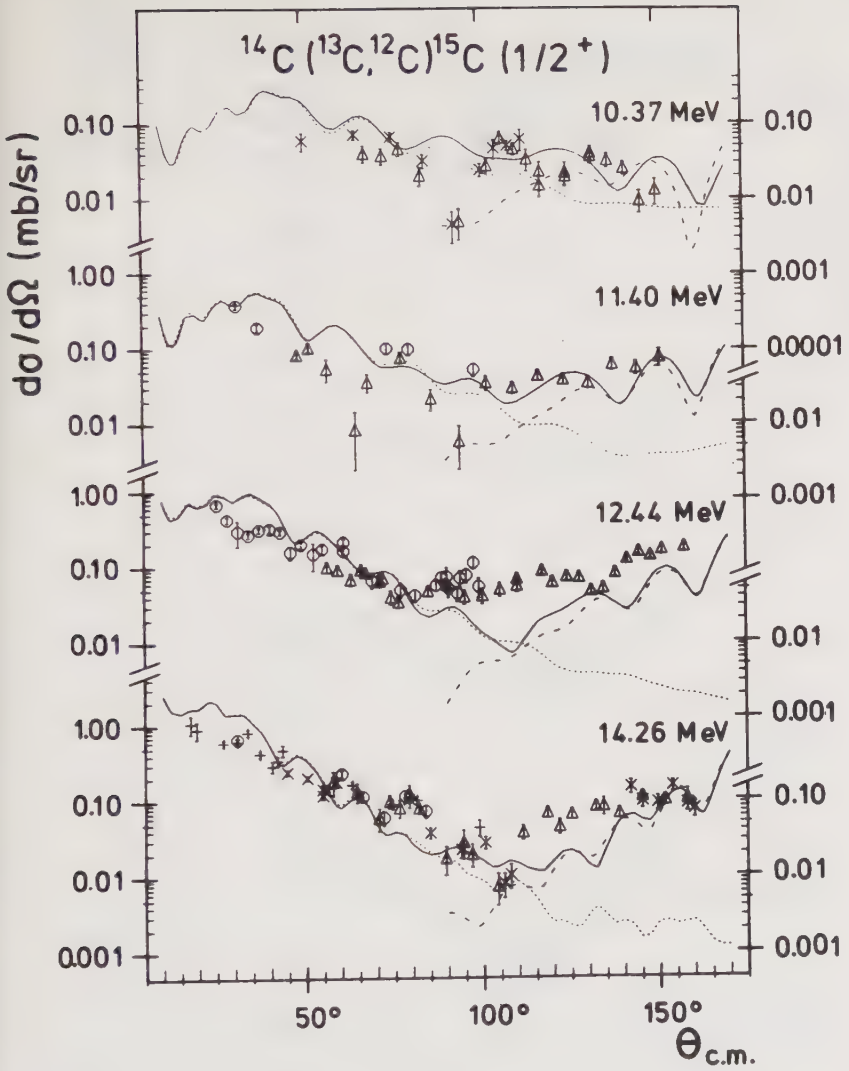


Fig.40: Winkelverteilungen der Reaktion $^{14}C(^{13}C,^{12}C)^{15}C(1/2^+)$. Die gepunktete Kurve ist die kohärente Summe aller Vorwärtsamplituden. Die gestrichelte Linie ist die mit Faktor 10 multiplizierte kohärente Summe der Rückwärtsamplituden. Die durchgezogene Kurve erhält man durch kohärente Addition der Vorwärts- und Rückwärtsamplituden.

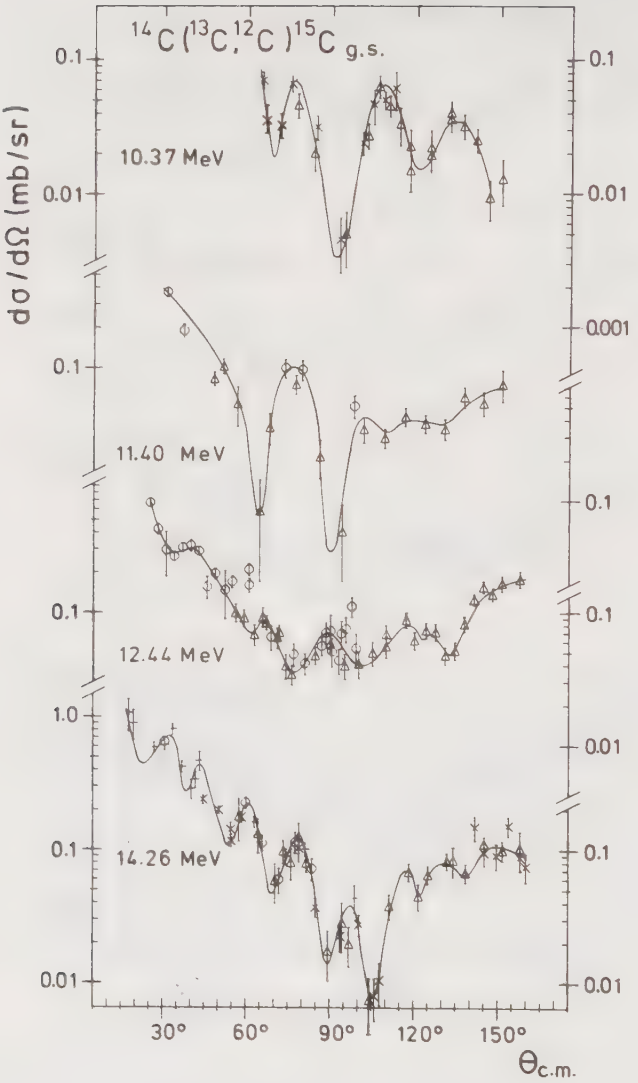


Fig. 41: Winkelverteilungen der Reaktion $^{14}C(^{13}C,^{12}C)^{15}C(1/2^+,gs)$.
Die durchgezogenen Linien sind Sichthilfen.

Wiedergabe der Daten bei niedrigen Energien und die Tatsache, daß bei diesem Kanal bei der höchsten Energie ein "out of phase"-Verhalten zu beobachten ist, läßt auf das Vorhandensein molekularer Effekte schließen. Die plötzliche Formänderung der Winkelverteilung zwischen E_{cm} = 11.4 und 12.44 MeV wird möglicherweise durch Landau-Zener-Übergänge verursacht.

6. Diskussion

Die Resultate dieser Arbeit lassen sich für das System $^{13}C+^{12}C$ wie folgt zusammenfassen:

(i) Die Tatsache, daß CRC-Rechnungen, bei denen Molekülwellenfunktionen verwendet werden, die Daten in dem betrachteten Energiebereich reproduzieren, wird als Evidenz für die Bildung kovalenter Kernmoleküle interpretiert.

(ii) In der atomaren Molekülphysik ergibt eine erhöhte Aufenthaltswahrscheinlichkeit der Valenzelektronen zwischen den atomaren Rümpfen bindende Molekülorbitale. RMO-Rechnungen zeigen, daß es sich bei den bindenden Zuständen mit hoher Konzentration der Neutronendichte zwischen den Kernen um Orbitale mit positiver Gesamtparität π = + handelt. Die Winkelverteilung der inelastischen Streuung ($^{13}C(1/2^+)+^{12}C$) bei E_{cm} = 7.80 MeV wird ausschließlich von π = + Zuständen bestimmt. In diesem Energiebereich bilden sich also bindende Molekülzustände.

(iii) Die CRC-Analyse der Daten ergibt weiter, daß die "direkten Prozesse" in der Rechnung enthalten sein müssen, um die Absoluthöhe der Daten zu reproduzieren. Die direkten Prozesse stellen aber die Wechselwirkung dar, die zu einer Störung der asymptotischen Einteilchenorbitale führt, und damit die Voraussetzung für einen Effekt schafft, der aus der Molekülphysik als Hybridisierung bekannt ist. Die Tatsache, daß die DI-Prozesse unbedingt nötig sind um die Absoluthöhe der gemessenen Wirkungsquerschnitte zu reproduzieren, zeigt deutlich, daß Hybridisierungseffekte bei der Ausbildung der $^{13}C+^{12}C$-Moleküle eine wesentliche Rolle spielen.

(iv) Die plötzliche Formänderung der gemessenen Winkelverteilungen des $^{13}C(1/2^+)+^{12}C$-Kanals innerhalb eines kleinen Ener-

gieintervalls wird als Evidenz für das Auftreten von Landau-Zener-Übergängen interpretiert. Diese Interpretation wird durch Ergebnisse von RMO-Rechnungen gestützt, die zeigen, daß es in den adiabatischen Potentialen "advoided crossings" gibt, und daß die radiale Kopplung Δv_{21} für Zustände mit der Gesamtparität π = - bei einem Abstand, der etwas kleiner als der Barrierenradius ist, stark gepeakt ist. Dies führt dazu, daß durch Beimischung von π = - Zuständen eine drastische Änderung der Winkelverteilung erfolgt. Diese Beimischung ist möglich, sobald die Projektilenergie ausreicht um die Barriere zu überwinden.

Im $^{13}C+^{12}C$ - System treten also aus der atomaren Molekülphysik bekannte Effekte wie

- Ausbildung bindender Molekülzustände
- Hybridisierung
- Landau-Zener-Übergänge

auf.

Beim System $^{13}C+^{14}C$ sind die gemessenen Wirkungsquerschnitte aller Ausgangskanäle im Rahmen einer DWBA-Analyse 2.Ordnung reproduzierbar. Eine Ausnahme bildet der Kanal $^{12}C+^{15}C(gs)$. Der Wirkungsquerschnitt dieses Kanals zeigt bei E_{cm} = 14.26 MeV ein "out of phase" Verhalten verglichen mit den DWBA-Rechnungen. Dieses Verhalten wird allgemein (Ref.18,19,36) als Evidenz für das Auftreten von Moleküleffekten interpretiert. Bei niedrigen Energien weicht die Rechnung völlig von den Daten ab. Zwischen E_{cm} = 11,40 und 12.44 MeV erfolgt eine plötzliche Formänderung der Winkelverteilungen. Dies könnte wie beim System $^{13}C+^{12}C$ einen Hinweis auf Landau-Zener-Übergänge darstellen.

Die in dieser Arbeit durchgeführten Experimente und Rechnungen zeigen, daß die molekularen Effekte in der Kernphysik keineswegs auf Edelgas-Bindungs-ähnliche Molekülstrukturen (wie bei $^{12}C+^{12}C$ oder $^{16}O+^{12}C$) beschränkt sind. Die Ergebnisse zeigen vielmehr, daß die Effekte der atomaren Molekülphysik in ihrer ganzen Vielfalt in der Schwerionenstreuung bestimmter Systeme auftreten.

Literaturhinweise

1) W. Treu, Dissertation, Erlangen 1980

2) F. Siller, Dissertation, Erlangen 1975

3) I. Weitzenfelder,. Dissertation, Erlangen 1986

4) J.L. Wiza, Nucl. Instr. and Meth. 162(1959) S.587

6) Teilchendiskriminator TD4, Entwicklung des HMI Berlin

7) N. Bischof, Diplomarbeit, Erlangen 1982

8 N. Bischof, Programm DOUBLE, Programm FRITZ, unveröffentlicht

9) W. von Oertzen, B. Imanishi, Nucl. Phys. A424(1984) S.262-312

10) B. Imanishi, W. von Oertzen, Molecular Orbitals of Nucleons in Nucleus-Nucleus collisions, to be published

11) Tamura, Udagawa, Phys. Rep. 65, No.5(1980) S.345-398

12) Landowne, Schlicher, Wolter, Nucl.Phys. A373(1982) S.141-172

13) Tamura, Phys. Rep. 14, No.2(1974) S. 59-69

14) Park, Scheid, Greiner, Phys.Rev.C 25,No.4(1982) S.1902

15) W. Treu, Hauser Feshbach Code HAUS, Erlangen, unveröffentlicht

16) H. Fröhlich et al., Nucl.Phys. A420(1984) S.124-140

17) H. Voit et al., Nuclear Landau Zener effect in $^{12}C+^{13}C$ scattering, to be published.

18) R.M. De Vries et al., Phys.Rev.Lett. 32(1974)

19) K.G. Nair et al., Phys.Rev.Lett. 33(1974) S.1588

20) S. Landowne, R. Schlicher and H. Wolter, Nucl.Phys.A373 S.141

21) W. von Oertzen, B. Imanishi, Lecture Notes in Phys.156(1981) S.388

22) E. Almquist, D.A. Bromley and J.A. Kuehner, Phys.Rev.Lett.4(1960) S.514

23) W. Treu, H. Fröhlich, P. Dück and H. Voit, Phys.Rev.Lett.28(1983) S.735

24) H. Fröhlich, P. Dück, W. Treu and H. Voit Phys.Rev.C27(1983)S.578

25) W. von Oertzen, Nucl.Phys. A148(1970) S.529
W. von Oertzen and H.G. Bohlen, Phys.Rep.19C(1975)

26) K.G. Nair et al., Phys.Rev. C5(1979) S.1575

27) Anyas-Weiss et al., Phys.Rep. 12C(1974) S.201

29) C.A. Pearson et al., Nucl.Phys. A191(1972) S.1

30) R.N. Glover and A.D.W. Jones, Nucl.Phys. 84(1966) S.673

31) S.E. Darden et al., Nucl.Phys. A208(1973) S.77

32) Y. Abe an J.Y. Park, Phys.Rev. C28(1983) S.2316

33) N. Cindro et al., Phys.Rev. C33(1986) S.1280

34) H. Voit et al., Nucl.Phys. A179(1972) S.23

35) A. Gilbert and A.G.W. Cameron, Can.Journal of Phys. 43(1965) S.1446

36) E.A. Seglie et al., Phys.Rev.Lett. 42(1979) S.956

J.F. Petersen et al., Phys.Lett. D94(1980) S.32
J.F. Petersen et al., Phys.Rev. C28(1983) S.710

37) S. Cohen and D.Kurath, Nucl.Phys. A101(1967) S.1

38) F.E. Cecil et al., Nucl.Phys. A255(1975) S.243-249

39) Philpott, Nucl.Phys. A208, S.236

40) R.A. Dayras et. al., Nucl. Phys. A265(1979)S.153

41) C.M. Perey and F.G. Perey, Atomic Data and Nucl. Data Tables Vol.17,No.1(1976)

Lebenslauf

Am 31.08.1955 wurde ich in Ebermannstadt geboren.
Meine Eltern sind Hedwig Bischof, geborene Stasch, Hausfrau und Johann Bischof, Mechanikermeister.

1961 bis 1965 besuchte ich die Volksschule in Ebermannstadt.
1965 trat ich in das Neusprachliche Gymnasium in Forchheim ein.
Dort legte ich 1974 die Reifeprüfung ab.

Vom Oktober 1974 bis September 1976 leistete ich Wehrdienst.

Im November 1976 begann ich mein Physikstudium.
Im Mai 1982 legte ich die Diplomprüfung ab.

Seit Juni 1982 bin ich bei Prof. Dr. H. Voit als Wissenschaftlicher Mitarbeiter tätig.

Herrn Prof. Dr. H.Voit danke ich für die Überlassung und Betreuung dieser Arbeit. Seine tätige Unterstützung beim Experiment und bei den Rechnungen war eine sehr große Hilfe.

Den Kollegen von der Erlanger Schwerionengruppe Frau Weitzenfelder, Herrn Dr. H. Fröhlich, Herrn Dipl.Phys. B. Nees, Herrn Dipl.Phys. E. Nieschler und Herrn Dipl.Phys. W. Tiereth danke ich für die Mitarbeit bei den Messungen und für ihre Kameradschaft.

Herr Fröhlich baute das Flugzeitteleskop in der verwendeten Form auf.

Herrn Prof. Dr. H. Wolter danke ich dafür, daß er uns die Rechenprogramme überließ und uns bei deren Anwendung unterstützte.

Herrn Prof. Dr W. von Oertzen danke ich für klärende Gespräche.

Herrn Dr. H.J. Maier vom Targetlabor der Sektion Physik der Universität München danke ich für die Herstellung der ^{14}C-Targets.

Den Mitarbeitern des Hauses danke ich für alle Hilfeleistungen.